KRISTALLSTRUKTUR UND ELEKTRISCHE LEITFÄHIGKEIT EINIGER ORGANISCHER HALBLEITER

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
des Fachbereichs Chemie
der Universität Berlin

vorgelegt von
Dieter Zobel
aus Berlin

1977

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41544720_0025

KRISTALLSTRUKTUR UND ELEKTRISCHE LEITFÄHIGKEIT EINIGER ORGANISCHER HALBLEITER

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung der Doktorwürde

des Fachbereichs Chemie

der Universität Berlin

vorgelegt von

Dieter Zobel

aus Berlin

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Erster Berichter : Prof. Dr. G. Ruban
Zweiter Berichter : Prof. Dr. G. Koßmehl

Tag der mündlichen Prüfung : 28. 2. 1977

INHALTSVERZEICHNIS

		Seite
1.	Einleitung	1
1.1	Überblick	1
1.2	Problemstellung	2
2.	Grundlagen des organischen Halbleiters	3
2.1	Einordnung und Definition	3
2.2	Der eindimensionale Potentialtopf	4
2.3	Periodisches Potential und Bändermodell	5
2.4	Potentialmodell für Systeme mit unvollständig delokalisierten π-Elektronen unter Berücksichtigung intermolekularer Wechselwirkungen	8
3.	Photoleitfähigkeit und Temperaturabhängigkeit	11
4.	Begriffe und Gesetzmäßigkeiten der Strukturanalyse durch Röntgenbeugung	12
5.	Experimentelles	16
5.1	Herstellung der Einkristalle	16
5.2	Bestimmung der kristallographischen Größen und Datensammlung	16
5.3	Strukturbestimmung und Verfeinerung der einzelnen Verbindungen	19
5.3.1	Das 1,2-Di-2-thienylethylen	19
5.3.2	Das 1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen	23
5.3.3	Das 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophen	27
5.3.4	Das 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol	31
5.3.5	Das 2,5-Distyrylthiophen	35
5.4	Ergebnisse der Strukturanalysen	39
5.5	Messungen der anisotropen elektrischen Leitfähigkeit	47
5.5.1	Beschreibung der Meßapparatur und des Meßverfahrens	47
5.5.2	Ergebnisse der Messungen der anisotropen elektrischen Leitfähigkeit	51
5.6	Messungen der spektralen Photoleitfähigkeit	55

		Seite
6.	Vergleich der röntgenographischen Daten mit HMO-Berechnungen	59
7.	Diskussion	61
8.	Ausblick	65
9.	Zusammenfassung	66
10.	Anhang: Tabellen der Strukturdaten von:	67
	1,2-Di-2-thienylethylen	67
	1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen	71
	2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophen	77
	1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol	87
	2,5-Distyrylthiophen	97
11.	Literaturverzeichnis	104

1. Einleitung

1.1 Überblick

Neben der außerordentlichen Bedeutung anorganischer Halbleiter (Si für Transistor- und Mikrochiptechnik, GaAs für Optoelektronik) gewinnen auch organische Halbleiter ein steigendes wissenschaftliches und auch technisches Interesse. Als Beispiel seien die Verwendung organischer und polymerer organischer Halbleiter als Photoleiter, für die Reproduktionstechnik, als Piezoelemente und als spezielle Katalysatoren genannt (siehe /1/).

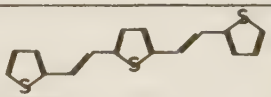
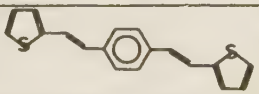
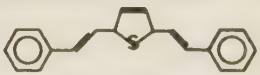
Im Rahmen eines von der Freien Universität Berlin anerkannten und geförderten Forschungsprojektschwerpunktes: „Organische und Polymere Organische Halbleiter" werden neue organische Verbindungen gezielt synthetisiert, nach verschiedenen Methoden charakterisiert und auf ihre elektrische Leitfähigkeit untersucht.

Zur Charakterisierung der elektrischen Leitungsmechanismen ist die genaue Kenntnis der Struktur der Moleküle und deren Anordnung zueinander im Festkörperverband sowie dessen Aufbau von außerordentlicher Bedeutung. Mit Hilfe von Kristallstrukturanalyse, Messung der anisotropen elektrischen Leitfähigkeit und deren vergleichender Gegenüberstellung will diese Arbeit einen Beitrag zu obigem Thema leisten.

1.2 Problemstellung

Unter dem bei 1.1 aufgeführten Gesichtspunkt wurden von Koßmehl, Manecke und Mitarb. /2/, /3/ organische Verbindungen verschiedener Struktur synthetisiert. Zu diesen gehören unter anderem Verbindungen, welche ein oder mehrere Thiophenringe enthalten und relativ große, mehr oder weniger gut durchkonjugierte π-Elektronensysteme darstellen.

Die hier vorgelegte Arbeit soll den möglichen Ladungsträgertransport durch das Molekül (Grad der Delokalisierung der π-Elektronen) und durch den Kristallverband untersuchen. Dazu sollen an einigen gut vergleichbaren Verbindungen oben erwähnter Substanzklasse Röntgenstrukturanalysen und Messungen zur anisotropen elektrischen Leitfähigkeit vorgenommen werden (siehe Tab. 1). Ferner wird ein Meßplatz projektiert und z.T. erstellt, der weiterführende Untersuchungen erlaubt, um gewisse Modellvorstellungen zu erhärten.

Verbindung Nr.	Name	Bruttoformel	Struktur
I	1,2-Di-2-thienyl-ethylen	$C_{10}H_8S_2$	
II	1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen	$C_{12}H_{10}S$	
III	2,5-Bis(2-thienyl-vinyl)thiophen	$C_{16}H_{12}S_3$	
IV	1,4-Bis(2-thienyl-vinyl)benzol	$C_{18}H_{14}S_2$	
V	2,5-Distyrylthiophen	$C_{20}H_{16}S$	

Tab. 1: Die in dieser Arbeit verwendeten Strukturen

2. Grundsätzliches über Halbleiter

2.1 Einordnung und Definition der Halbleiter

Mittels der nahezu freien Elektronen-Näherung können für sehr viele kristalline Festkörper auf der Basis des Bändermodells gewisse Energiebänder berechnet werden. Für das elektrische und optische Verhalten sind dabei meist zwei Bänder, das Valenzband und das Leitungsband, von besonderer Bedeutung. Der energetische Abstand dieser beiden Bänder erlaubt eine grobe Einteilung der Festkörper in Isolatoren mit sehr großem Bandabstand im Gegensatz zu sich überlappenden Bändern bei den Metallen; dazwischen erstreckt sich das Gebiet der Halbleiter mit Bandabständen etwa zwischen 0,3 und 3 eV.

Ursprünglich wurde der Begriff Halbleiter für solche Stoffe eingeführt, deren elektrische Leitfähigkeit zwischen der der Metalle und der der Isolatoren lag, also im Bereich zwischen 10^{2} und $10^{-10}\Omega^{-1}cm^{-1}$. Somit müßten auch Elektrolyte oder feuchter Bindfaden Halbleiter sein. Um dies auszuschließen, muß eine genauere Definition des Begriffes „Halbleiter" gegeben werden. Unter Halbleiter sollen hier Substanzen gemeint sein, die folgende Eigenschaften besitzen:

Es sollen kristalline bzw. teilkristalline polymere Festkörper sein, deren elektrische Leitfähigkeit

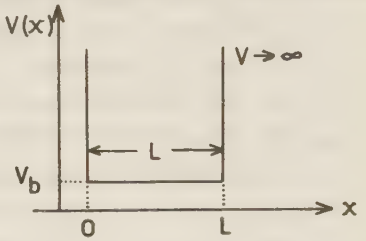
1. bei Zimmertemperatur zwischen 10^{3} und $10^{-15}\Omega^{-1}cm^{-1}$ liegt;
2. mit steigender Temperatur gemäß $\sigma = \sigma_{o} \cdot e^{-\frac{E}{2kT}}$ zunimmt;
3. bei Belichtung höher ist als im Dunkeln;
4. durch festkörperphysikalische Eigenschaften grundsätzlich erklärbar ist.

2.2 Der eindimensionale Potentialtopf

Betrachtet man ein lineares π-Elektronensystem, z.B. ein Kohlenwasserstoff-Molekül mit konjugierten Doppelbindungen, kann man von in gewissen Grenzen frei beweglichen Elektronen ausgehen. Das sind die nicht zur chemischen Bindung beitragenden π-Elektronen. An den Molekülenden werden dagegen starke Coulomb-Anziehungskräfte verhindern, daß die Elektronen das Molekül verlassen können. Zur näherungsweisen Beschreibung kann das Modell eines Potentialtopfes verwendet werden mit den Randbedingungen:

$$V(x) = V_b \quad \text{für } 0<x<L$$

$$\text{und} \quad V(x) = \infty \quad \text{für } \begin{cases} x \leq 0 \\ x \geq L \end{cases}$$



für den eindimensionalen Fall, in welchem sich die delokalisierten Elektronen als freies Elektronengas nach dem Modell von H. Kuhn /4/ bewegen. In der Einelektronen-Näherung ist dies Grundlage für das LCAO-HMO-Modell, welches die verschiedenen Energiestufen der Molekularorbitale zu berechnen gestattet.

Der Hamilton-Operator in diesem Potential ist dann:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_b \qquad (1)$$

und die Schrödingergleichung für das π-Elektron:

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E_n - V_b)\psi_n = 0 \qquad (2)$$

Mit dem Ansatz

$$\psi_n = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + B \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad , \qquad (3)$$

den Randbedingungen des Potentials und für den Fall $V_b = 0$ erhält man die bekannten Energieeigenwerte:

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2 \qquad (n = 1,2,3,\ldots) \qquad (4)$$

Man erhält damit das Termschema der Einelektronen-Näherung, wobei jeder Term nach dem Pauliverbot nur maximal mit zwei Elektronen unterschiedlicher Spinquantenzahl besetzt ist. Gegenüber der kontinuierlichen Energieaufnahme für das freie Elektron erhält man jetzt diskrete Energieniveaus, die mit n^2 wachsen.

In diesem Modell sind sehr gut die Energieniveaus von solchen organischen Molekülen zu beschreiben, deren π-Elektronen vollständig, wie beim Benzol, oder nahezu vollständig, wie z.B. bei den Polymethinfarbstoffen, delokalisiert sind.

2.3 Periodisches Potential und Bändermodell

Im Festkörper (z.B. Ionenkristall) bewegen sich die Elektronen im periodischen Potential der Atomrümpfe. In erster Näherung läßt sich dieser Potentialverlauf als periodisches Kastenpotential ansetzen. Die Elektronen befinden sich in Potentialtöpfen, die von Barrieren der Höhe V_o gebildet werden.

Für die Schrödingergleichung in den zwei Bereichen erhält man (siehe Fig. 1):

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_n = 0 \qquad 0 \leq x \leq a \qquad (5)$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\,\psi = 0 \qquad -b \leq x \leq a \qquad (6)$$

Kramers /18a/ hat allgemein gezeigt, daß die Eigenwerte der Schrödingergleichung zu Energiebandstrukturen führen, wenn das Potential, in dem sich das Elektron bewegt, periodisch ist. Eine relativ einfache eindimensionale Näherung eines solchen Problems wurde von Kronig und Penney /5/ behandelt.

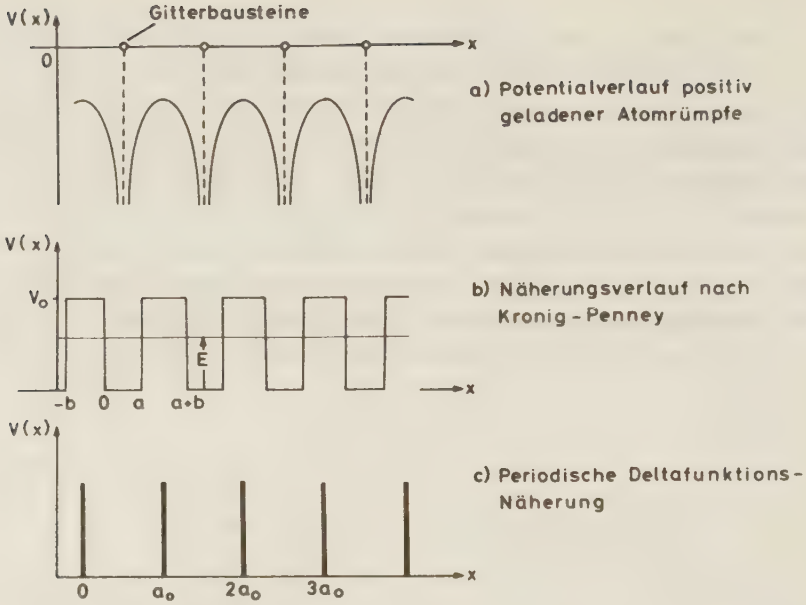


Fig. 1: Potentielle Energie eines Elektrons bei verschiedenen Potentialansätzen

Sei $V(x) = 0$ für $nL<x<nL+a$ $\quad L = a+b$

und $V(x) = V_o$ für $nL-b<x<nL$ $\quad n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$

(siehe Fig. 1) so ist $V(x+L) = V(x)$

Die Lösung der Schrödingergleichung muß ebenfalls periodisch sein:

$$\psi(x+nL) = e^{ikL}\psi(x) \qquad (7)$$

wobei nach de Brogli der Elektronenzustand als Materiewelle der Wellenlänge

$$\lambda = \frac{1}{K} = \frac{\lambda}{2\pi}$$

bezeichnet wird, K heißt der Ausbreitungsvektor (im dreidimensionalen Fall). Es sei $E<V_b$ und

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad , \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_o - E) \quad ; \qquad (8)$$

dann können für die einzelnen Bereiche folgende Lösungsansätze gemacht werden:

$$\left.\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 e^{\beta x} + B_1 e^{-\beta x} && \text{für } -b<x<0 \\ \psi_2 &= A_2 e^{i\alpha x} + B_2 e^{-i\alpha x} && \text{für } 0<x<a \end{aligned}\right\} \quad (9)$$

und eine Periode weiter:

$$\left.\begin{aligned} \psi_3 &= e^{ikl}\,(A_1 e^{\beta(x-L)} + B_1 e^{-\beta(x-L)}) \\ \psi_4 &= e^{ikl}\,(A_2 e^{i\alpha(x-L)} + B_2 e^{-i\alpha(x-L)}) \end{aligned}\right\} \; a<x<L$$

Unter Verwendung der Stetigkeit der Funktion und deren 1. Ableitung bei x = 0, -b, a erhält man dann nach Lösung der Differentialgleichung eine Beziehung zwischen der Elektronenenergie E und dem Wellenvektor K:

$$\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\alpha\beta} \sin \alpha a \cdot \sinh \beta b + \cos \alpha a \cdot \cosh \beta b = \cos KL \qquad (10)$$

Macht man nun nach /5/ den Grenzübergang $b \to 0$ und $V_0 \to \infty$ derart, daß $V_0 \cdot b$ endlich bleibt, bedeutet das unendlich hohe Potentialwände endlicher Durchlässigkeit. Dann geht $\beta \cdot b \to 0$ und es wird $L = a_0$ und (10) geht über in

$$\cos \alpha a_0 + \frac{\beta}{2\alpha} \cdot \beta \cdot b \sin \alpha a = \cos K a_0 \qquad (11)$$

Auf der linken Seite steht eine Funktion der Energie allein:

$$f(E) = \cos K a_0$$

Damit eine Gleichung dieser Art erfüllt sein kann, muß $|f(E)| < 1$ sein. Dies tritt stets innerhalb endlicher Bereiche der Variablen E ein, so daß man ein Energiespektrum erhält, das sich aus einzelnen erlaubten und verbotenen Bereichen, den sogenannten Energiebändern, zusammensetzt. Eine ausführliche mathematische Behandlung von (10) und (11) über Lage und Art der Bänder findet sich in /6/.

Aus diesem Modell lassen sich u.A. folgende Aussagen machen:

1. Im unendlich ausgedehnten Kristall wird die Lösung der Schrödingergleichung periodisch.
2. Für die Energiezustände der Elektronen gibt es erlaubte

und verbotene Bereiche (Bänder).

3. In jedem erlaubten Energiebereich gibt es beim unendlich ausgedehnten Kristall unendlich viele Energieniveaus.
4. Die erlaubten Bänder sind je tiefer desto schmaler (zunehmende Entkopplung der einzelnen Potentialtöpfe). Mit wachsender Energie werden sie breiter und die Zwischenräume schmaler.

Zusammenfassend ergibt sich auf der Basis des Bändermodells: aus den diskreten Energieniveaus bei dem Modell des Potentialtopfes (2.2) werden unter Einwirkung eines aus unendlich vielen solcher Töpfe bestehenden eindimensionalen Potentialmodells verschieden breite Energiebänder. Im allgemeinen wird das unterste, mit Elektronen voll besetzte Energieband Valenzband und das erste nicht voll besetzte Band Leitfähigkeitsband genannt.

2.4 Potentialmodell für Systeme mit unvollständig delokalisierten π-Elektronen unter Berücksichtigung intermolekularer Wechselwirkung

Wie schon in (2.2) beschrieben, kann die Energieverteilung bei vollständig delokalisierten π-Elektronen durch einen Potentialtopf der Länge L beschrieben werden. Dabei ist dann $L = n \cdot l$, mit $l \approx 1{,}4$ Å und $n = 1,2,3,\ldots$, also die Anzahl der C-C-Bindungen (Fig. 2a).

Bei Systemen mit unvollständig delokalisierten π-Elektronen, wie z.B. bei den Polyenen sind Einfach- und Doppelbindungen naturgemäß unterschiedlich lang. So wird die potentielle Energie des Elektrons entlang der Kette stärker zunehmen im Bereich der Einfachbindung als bei der Doppelbindung wegen der Abschirmung der Kernladung durch die Restelektronen, welche mit steigender Entfernung vom Kern zunimmt /4/. Dieses Verhalten wird, durch Einführung eines Störpotentials beschrieben /1/, derart, daß die Energieniveaus nach höheren Energien verschoben sind. Damit ist auch die Energiedifferenz zwischen dem höchsten be-

setzten Niveau E_2 und dem tiefsten unbesetzten E_3 größer (Fig. 2b).

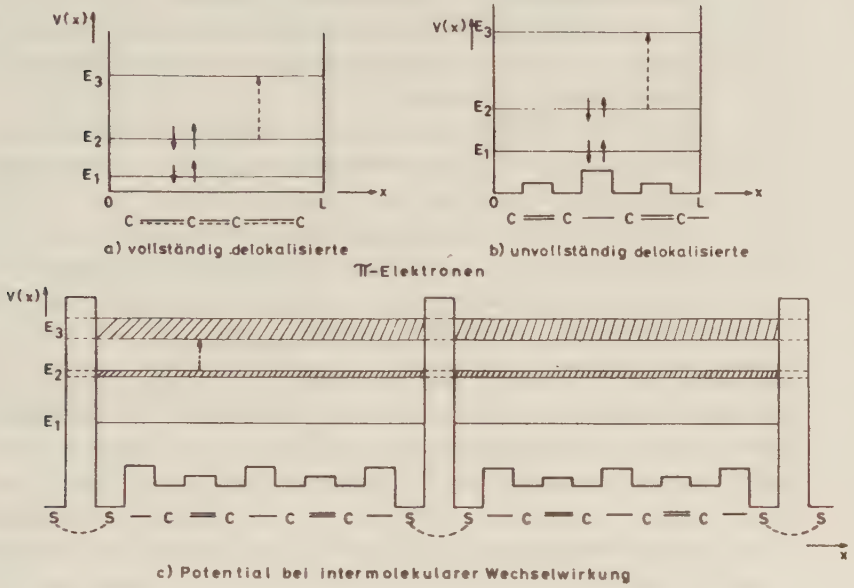


Fig. 2: Verschiedene Potentialmodelle

Dieses Modell (Fig. 2b) in Verbindung mit dem des periodischen Potentials (2.3) ergibt einen möglichen Potentialvorschlag für die hier zu untersuchenden Verbindungen (Tab. 1). In Fig. 2c ist dieser Sachverhalt schematisch dargestellt. Liegen die Moleküle im kristallinen Festkörper nur soweit voneinander getrennt, daß eine Molekülorbitalüberlappung angenommen werden kann, wird die Barriere zwischen benachbarten Molekül-Potentialtöpfen für die quasi-freien Elektronen zu einem gewissen Grade durchlässig (Kronig-Penney-Modell). Mit abnehmender Barrierenbreite steigt die Wahrscheinlichkeit, das Elektron auch beim Nachbarmolekül anzutreffen. Eine mathematische Behandlung dieses Modellvorschlages steht noch aus, doch können einige allgemeine Betrachtungen für die Leitfähigkeit an organischen Kristallen

angestellt werden:

1. Die π-Elektronen werden im Molekül (der hier vorgelegten Verbindungen) nur unvollständig delokalisiert sein;
2. für einen möglichen Ladungsträgertransport müssen die bereits freien Elektronen eine intermolekulare Potentialbarriere durchdringen;
3. durch Energieaufnahme wird es möglich sein, weitere lokalisierte Elektronen in den quasi-freien Zustand zu überführen ($E_2 \rightarrow E_3$ in Fig. 2c);
4. wird die Orbitalüberlappung an den Molekülen (durch die punktierte Kurve zwischen den S-Atomen angedeutet) geringer durch größere intermolekulare Abstände, nimmt auch die Durchlässigkeit der Potentialbarriere ab.

Es wird vorgeschlagen, das Bändermodell zur Beschreibung des Ladungsträgertransports durch den Festkörper zu verwenden, wenn der intermolekulare Abstand kleiner als 10 Å ist /1/. Alle bisherigen Betrachtungen berücksichtigen nur den eindimensionalen Fall. Die intermolekularen Abstände werden aber in verschiedenen kristallographischen Richtungen im allgemeinen verschieden groß sein, so daß auch verschieden starke π-Orbitalwechselwirkungen benachbarter Moleküle auftreten werden. Es ist also mit einer Anisotropie der Leitfähigkeit zu rechnen.

3. Photoleitfähigkeit und Temperaturabhängigkeit

Unter Photoleitung versteht man die Änderung der elektrischen Leitfähigkeit infolge der Absorption elektromagnetischer Strahlung. Dabei handelt es sich im wesentlichen um eine Zunahme der quasi-freien Elektronen. Durch Veränderung der Wellenlänge der Strahlung kann die Energie der Photonen so groß werden, daß Elektronen direkt aus dem obersten besetzten Band (Valenzband) in das unterste schwach besetzte Band (Leitungsband) gelangen (Grundgitterabsorption). Aus der langwelligen Absorptionskante kann dann gemäß $h \cdot \nu = \Delta E$ die Energielücke zwischen beiden Bändern, also zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband, ermittelt werden. Die angeregten Elektronen können dann durch ihren Beitrag zur elektrischen Leitfähigkeit nachgewiesen werden.

Ferner kann eine Änderung der Elektronenbeweglichkeit im Festkörper eintreten. Da die Ladungsträgerkonzentration (n) und deren Beweglichkeit (μ) oft in komplizierter Weise von der Temperatur abhängen, gilt dies auch für die Leitfähigkeit gemäß: $\sigma = e \cdot n \cdot \mu$

Im einfachsten Fall läßt sich aber mit Hilfe der statistischen Thermodynamik zeigen, daß für einen Halbleiter ohne Störstellen eine allgemeine Temperaturabhängigkeit gilt (/1/):

$$\sigma = \sigma_o \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right) \qquad (12)$$

Dabei ist k die Boltzmann-Konstante, T die absolute Temperatur und ΔE die Energiebreite des verbotenen Bandes zwischen dem Valenz- und dem Leitungsband.

4. Begriffe und Gesetze zur Strukturanalyse durch Röntgenbeugung

Der Messung direkt zugänglich ist wie bei allen Streuexperimenten nur die Intensität, während die Elektronendichteverteilung in der Elementarzelle gesucht ist. Die gestreute Welle ist aber wie bei allen elektromagnetischen Vorgängen im allgemeinen Fall durch eine komplexe Welle zu beschreiben:

$$\psi = A \cdot e^{i\phi}$$

bzw. für die hier interessierende Röntgenbeugung am Einkristall:

$$F(\vec{h}) = |F(\vec{h})| \exp[i\phi(\vec{h})] \qquad (13)$$

Aufgrund der bei der Röntgenstrukturanalyse üblicherweise verwendeten Dimension der Versuchsanordnung und der im realen Kristall vorliegenden Mosaikwinkelverschwenkung wird in der kinematischen Theorie der Röntgenbeugung von der Frauenhofer Näherung ausgegangen.
So ist die Intensität: $I = F(\vec{h}) \cdot F(\vec{h}) = F(\vec{h})^2$ (14)
Unter Berücksichtigung des dreidimensional periodischen Kristallaufbaus wird aus (13):

$$F(\vec{h}) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\vec{x}) \exp\left[2\pi i \vec{h}\vec{x}\right] dV_x \qquad (15)$$

Dieses dreidimensionale Fourierintegral wird als Strukturamplitude bezeichnet, wobei $\vec{h}$ der Vektor im Fourier- bzw. reziproken Raum und $\vec{x}$ der im physikalischen Raum bedeutet. $\rho(\vec{x})$ ist die gesuchte Elektronendichteverteilung, die durch inverse Fouriertransformation von (15) zu erhalten ist:

$$\rho(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\vec{h}) \exp\left[-2\pi i \vec{h}\vec{x}\right] dV_h \qquad (16)$$

Mathematisch gesehen ist die Amplitude $F(\vec{h})$ in (13) völlig unabhängig von der Phase $\phi(\vec{h})$. Zur Berechnung von $\rho(\vec{x})$ ist deren Kenntnis aber notwendig.

Karle und Hauptmann /7/ konnten zeigen, daß es unter bestimmten Voraussetzungen möglich war, aus zwei bekannten Phasen eine weitere zu bestimmen. Sowohl durch algebraische als auch statistische Methoden wurde die sogenannte Tangensformel (17) hergeleitet, die die gegenwärtige Grundlage aller Strukturauf-

klärung durch direkte Phasenbestimmung im azentrischen Fall ist:

$$\tan \phi(h) = \frac{\sum_{\vec{k}} |E(\vec{h}-\vec{k})||E(\vec{k})| \cdot \sin\{\phi(\vec{h}-\vec{k}) + \phi(\vec{k})\}}{\sum_{\vec{k}} |E(\vec{h}-\vec{k})||E(\vec{k})| \cdot \cos\{\phi(\vec{h}-\vec{k}) + \phi(\vec{k})\}} \qquad (17)$$

Für den zentrosymmetrischen Fall reduziert sich das Phasenproblem auf die Bestimmung des Vorzeichens im Exponentialfaktor von (13). Das führt auf die sogenannte Σ_2 Formel (18). Dort gilt für den Erwartunswert der normierten Strukturamplituden $\langle E(\vec{h})\rangle$:

$$\langle E(\vec{h})\rangle = \frac{\sigma_3}{\sigma_2^{3/2}} \; E(\vec{h}-\vec{k})E(\vec{k}) \qquad (18)$$

Cochran und Wolfson haben Formeln entwickelt /8/, die die Wahrscheinlichkeit angeben, daß das Vorzeichen von $E(\vec{h})$ positiv ist. Eine recht übersichtliche Beschreibung all dieser Beziehungen findet sich in /9/.

Bei bekannten Ortsvektoren $\vec{x}_j$ der Atome j wird zur Berechnung der Strukturamplitude die Elektronendichteverteilung der Atome, die Atomformamplitude $f_j(\vec{h})$ verwendet. Da der Kristall als ein aus diskreten, endlich vielen Punktatomen aufgebautes Gitter betrachtet wird, ist analog zu (15):

$$F(\vec{h}) = \sum_j f_j(\vec{h}) \exp(2\pi i \vec{h}\vec{x}_j) \qquad (19)$$

Zur Berücksichtigung elastischer Gitterschwingungen wird ein weiterer Term T_j eingeführt, so daß aus (19) wird:

$$F(\vec{h}) = \sum_j f_j(\vec{h}) \; T_j \exp(2\pi i \vec{h}\vec{x}_j) \qquad (20)$$

Für isotrope Schwingungen ist:

$$T_j = \exp\{-2\pi^2 U(\frac{2\sin\vartheta}{\lambda})^2\} \qquad (21)$$

und für anisotrope:

$$T_j = \exp[-2\pi^2 (U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + U_{12}hka^*b^* + U_{13}hla^*c^* + U_{23}klb^*c^*)] \qquad (22)$$

Dabei sind a, b , c die üblichen reziproken Gitterkonstanten. Da es sich bei diesen Gitterschwingungen hauptsächlich um thermische Bewegungen der Atome handelt, wird U als isotroper und U_{ij} als anisotroper Temperaturfaktor bezeichnet.

Wie bei allen physikalischen Messungen, so ist bei der Röntgenbeugung die Festlegung eines Bezugspunktes (Nullpunkt) notwendig. Im allgemeinen Fall wird dieser durch die Wertezuweisung der Phasen von drei beliebigen Reflexen, entsprechend der drei Freiheitsgrade des Ortes festgelegt. Bei asymmetrischen Molekülen und azentrischer Raumgruppe kann Bild oder Spiegelbild im Kristall vorliegen, so daß dieser zusätzliche Freiheitsgrad durch Angabe der Phase eines weiteren Reflexes festgelegt werden muß (Festlegung der enantiomorphen Form der Struktur). Sowohl Anzahl als auch Art der zur Nullpunktsfestlegung erlaubten Reflexe wird im allgemeinen durch die vorliegende Raumgruppe und deren Symmetrie jeweils begrenzt. Welche Reflexe für die verschiedensten Raumgruppen durch Festlegung ihrer Phasen zur Nullpunktsdefinition geeignet sind, wurde z.B. von Hauptmann und Karle /10/ untersucht.

Zusätzlich zu den frei wählbaren Phasen legt man die Phasen weiterer Reflexe mit großem Wert des normierten Strukturfaktors $E(\vec{h})$ fest, um einen möglichst großen Startsatz für die Berechnung weiterer Phasen nach der Tangensformel (17) zu erhalten. Da diese Phasen aber nicht mehr frei wählbar sind, werden sie in 90°-Schritten beginnend bei 45° variiert, so daß sie mit einem Fehler von maximal $\pm 45^{\circ}$ im richtigen Quadranten der komplexen Zahlenebene liegen. Diese „Multisolution"-Methode ist Grundlage im MULTAN-Programm /11/. Weitere Lösungsmöglichkeiten sind in /12/ zusammenfassend dargestellt.

Zur Charakterisierung der Güte einer Strukturaufklärung hat sich der sogenannte R-Wert nach Gl. 23 eingebürgert, der aber nur ein relativ grobes Kriterium darstellt.

$$R = \frac{\sum_{\vec{h}} \left| |F_o(\vec{h})| - |F_c(\vec{h})| \right|}{\sum_{\vec{h}} |F_o(\vec{h})|} \qquad (23)$$

Anstelle dieses üblichen R-Wertes hat Hamilton /13/ einen bewichteten R-Wert eingeführt:

$$R_w = \sqrt{\frac{\sum_h w(|F_o(\vec{h})| - |F_c(\vec{h})|)^2}{\sum_h w|F_o(\vec{h})|^2}} \qquad (24)$$

Ist der Quotient zweier R_w-Werte, die sich durch Vergleich eines Modells mit einem zweiten, z.B. durch Einführung weiterer Parameter veränderten Modells, ergeben, größer als ein bestimmter in /13/ tabellierter Wert (abhängig von den Parametern der Struktur), so kann eine signifikante Verbesserung des Modells im Zuge der Verfeinerung angenommen werden.

5. Experimentelles

5.1 Herstellung der Einkristalle

Das 1,2-Di-2-thienylethylen und das 1-Phenyl-2-(2-thienyl) ethylen wurden nach der Synthese /2/ in Xylol umkristallisiert und ergaben blaßgelbliche Kristalle von stäbchenförmigem Habitus, die in den meisten Fällen aber schlecht ausgebildet waren. Die Kristalle der Verbindungen von 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophen (III), 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol (IV) und 2,5-Distyrylthiophen (V) wurden durch Sublimieren im Vakuum bei einigen 10^{-2} Torr erhalten. (Siehe Tabelle: 2).

Nr.	Schmelz-Temp. (°C)	Subl.	Farbe	Habitus
III	153 - 157	125	gelb-orange	plättchen-förmig
IV	272 - 273	190	hell-gelb	"
V	265	250	"	lineal-förmig

Tab. 2

Mit dem Polarisationsmikroskop wurden die Kristalle auf Verzwilligung untersucht.

5.2 Bestimmung der kristallographischen Größen und Datensammlung

Mit Hilfe der üblichen Drehkristall- und Weißenbergaufnahmen (deren Technik etwa bei Stout & Jensen /14/ und Woolfson /15/ ausführlich beschrieben ist) wurden die Gitterkonstanten ermittelt und die Elementarzellen festgelegt. Die systematischen Auslöschungen gaben Aufschluß über die möglichen Raumgruppen der einzelnen Verbindungen, deren endgültige Festlegung dann durch die Statistik der gemessenen Reflexe möglich war. Aus dem Elementarzellenvolumen und der nach der Schwebemethode ge-

messenen Dichte ergaben sich jeweils die Anzahl der Formeleinheiten pro Elementarzelle. In Tabelle 3 sind die Kristalldaten für die hier untersuchten Substanzen zusammengestellt. Die Präzisionsmessung der Gitterkonstanten wurde auf dem automatischen Einkristalldiffraktometer (AED der Firma Siemens) durchgeführt. Dabei ergaben sich die Fehler durch Kleinste-Quadrate-Berechnung.

Die Reflexintensitäten wurden für alle Strukturen auf dem gleichen AED nach dem Verfahren der Fünfwertmessung durchgeführt. Ausführliche Arbeitsweise des Gerätes siehe W. Dreissig /16/ sowie prinzipieller Aufbau und Meßverfahren siehe P. Luger /17/. Es wurde ausschließlich mit nickelgefilterter Cu-K_α-Strahlung gemessen, mit λ = 1,5418 Å. Der Θ-Winkel des Meßbereiches der Eulerwiege lag zwischen 3° und 70°. (Anzahl der jeweils vermessenen Reflexe siehe Tab. 3).

Dabei zeigte sich, daß für alle Strukturen die Referenzreflexe sich nicht mehr als um ca. 10 % änderten. Die Kristalle wurden für spätere Absorptionskorrekturberechnungen nach der Datensammlung optisch vermessen. Im DATRDN /18/ wurden Atomformfaktoren für S und C solche nach /19/ und für H nach /20/ verwendet.

Alle Rechnungen wurden auf einer CDC Cyber 72 der Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung der FU Berlin und seit Mitte 1976 auf einer CDC Cyber 175 des WRB mit dem Programm X-Ray /18/ erledigt. Die Zeichnungen der Moleküldarstellungen wurden mit dem Programm MOLPLOT /21/ am GRZ mit einer TR 440 hergestellt. Bei einer ersten Datenreduktion mit dem institutseigenen Programm AEDALS /22/ wurden die Nettointensitäten bestimmt, eine Skalierung über die Referenzreflexe vorgenommen und alle Reflexe, deren Intensität $I < 2\sigma_x$ (σ_x = statistischer Fehler) waren, als unbeobachtet eingestuft.

Struktur	I 1,2-Di-2-thienyl-ethylen	II 1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen	III 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophen	IV 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol	V 2,5-Distyryl-thiophen
Bruttoformel	$C_{10}H_8S_2$	$C_{12}H_{10}S$	$C_{16}H_{12}S_3$	$C_{18}H_{14}S_2$	$C_{20}H_{16}S$
Molekulargewicht	192,0	186,3	301,3	294,4	288,4
a (Å)	10,425 (5)	10,714 (5)	16,810 (6)	15,671 (6)	34,589 (5)
b (Å)	7,665 (7)	7,732 (7)	7,582 (7)	7,577 (7)	7,703 (7)
c (Å)	5,845 (4)	12,389 (5)	5,759 (4)	6,180 (4)	5,736 (6)
ß (°)	92,36 (5)	90 (-)	101,42 (6)	94,92 (4)	90 (-)
V ($Å^3$)	466,6	1005,57	719,51	733,1	1528,8
z	2	4	2	2	4
Raumgruppe	$P2_{1/a}$	Pbca	$P2_1$	$P2_1$	$P2_12_12_1$
F(000)	200	392	312	308	608
D_x ($g \cdot cm^{-3}$)	1,347	1,235	1,394	1,339	1,258
linear.Absorp.Koef. für CuKα (cm^{-1})	43,7	23,23	43,6	30,27	17,3
Reflexanzahl:					
gesamt	890	934	1477	1488	1354
beobachtet	866	768	1457	1443	1308
unbeobachtet	24	166	31	87	73
extinkt	-		3	1	3

Tab. 3: Kristallographische Daten

5.3 Strukturbestimmung und Verfeinerung der einzelnen Verbindungen

5.3.1 Das 1,2-Di-2-thienylethylen

Mit dem Programm DATRDN wurde eine Datenkorrektur bezüglich der Lorentz- und Polarisationsfaktoren sowie zusätzlicher Skalierungsfaktoren vorgenommen. Die mit Hilfe des Programms NORMSF berechnete statistische Verteilung der normierten Strukturfaktoren E konnte zur Bestätigung bzw. endgültigen Festlegung der Raumgruppe herangezogen werden (siehe Tab. 3). Je nach Raumgruppe und Stand der Programmentwicklung war die Lösung des Phasenproblems der einzelnen Strukturen etwas unterschiedlich, so daß sie im Einzelnen kurz besprochen werden soll. Gemeinsam war, daß alle Lösungsansätze durch konsequente Anwendung der direkten Methoden gefunden wurden.

Für die Struktur I, das 1,2-Di-2-thienylethylen, wurden aufgrund der Raumgruppe $P2_1/a$ drei linear unabhängige Reflexe zur Festlegung des Nullpunktes benötigt. Mit Hilfe des Programms SINGEN wurden für eine vorgegebene Anzahl von Reflexen die E-Werte, die HKL-Paritäten und die Anzahl der jeweiligen Tripletbeziehungen berechnet. Die drei Nullpunktsreflexe wurden so ausgewählt, daß sie einen möglichst großen E-Wert besaßen und in möglichst vielen Triplet-Phasenbeziehungen enthalten waren. Die Phasen dieser Reflexe wurden dann willkürlich zu 0 oder $\pi/2$ festgelegt, da sie wegen der Zentrosymmetrie nur +1 oder -1 sein konnten. Mit dem Programm PHASE wurden 147 Phasenbeziehungen gefunden und die Phasen der entsprechenden Reflexe mit einer Wahrscheinlichkeit > 95 % bestimmt. Mit Hilfe dieser Phasen wurde dann eine dreidimensionale Elektronendichteverteilung berechnet (Programm FOURR), aus welcher bereits das Schwefelatom und alle Kohlenstoffatome der asymmetrischen Einheit gefunden werden konnten. Bei dieser Struktur wurde zusätzlich die dreidimensionale Abstandsstatistik berechnet (Programm FOURR-Vectormap, /18/), aus welcher mittels der entsprechenden Harker-Schnitte bzw. Linien die Koordinaten des relativ schweren Schwefelatoms eindeutig bestimmt werden konnten. Diese waren in guter Übereinstimmung

mit dem Ergebnis der direkten Methoden. Eine erste Least-Squares-Verfeinerung von drei Zyklen (Programm CRYLSQ, /18/) und Rückrechnung mit den aus der Elektronendichteverteilung gewonnenen Koordinaten sowie eines allgemeinen aus dem NORMSF stammenden isotropen Temperaturfaktors (Gl. 21) von B = 4,5 Å ergab bereits einen R-Wert bezogen auf F (Gl. 23) von 9,1 %. Die Einführung von anisotropen Temperaturfaktoren (Gl. 22) ergab nach weiteren drei Zyklen einen R-Wert von 8,5 %. Somit konnte die Struktur hinsichtlich der Schweratome als gelöst angesehen werden.

Aus Differenzsynthesen konnten bereits drei der vier Wasserstoffatome gefunden werden. Diese wurden mit isotropen Temperaturparametern in die Verfeinerung mit einbezogen und lieferten nach drei Zyklen einen R-Wert von 7,1 %.

Mit dem Programm ABSORB /18/ wurde eine Absorptionskorrektur berechnet und ein Extinktionsparameter eingeführt /23/ und zur Verfeinerung freigegeben. In einer anschließenden Differenzsynthese konnte dann auch ein Elektronendichtemaximum dem noch fehlenden Wasserstoff H(3) zugerechnet werden. Eine anschließende Verfeinerung ergab aber, daß dieser Ladungsschwerpunkt sich in Richtung des Atoms C(3) auf eine Entfernung von 0,6 Å bewegte, was kaum noch als chemisch sinnvolle H-C-Bindung angesehen werden konnte. Das Atom H(3) wurde deshalb bei seiner theoretischen Lage mit 1,08 Å Abstand zum entsprechenden Kohlenstoff festgehalten. Die Berücksichtigung der anormalen Dispersion für Schwefel /24/ brachte erwartungsgemäß keine Änderung im R-Wert, da Bild und Spiegelbild des Moleküls identisch sind. Der abschließende R-Wert ergab sich dann zu 6,3 %.

Die endgültigen Atomkoordinaten, Bindungslängen und -winkel sowie eine Liste der beobachteten bzw. berechneten Strukturfaktoren sind in den Tabellen 5 bis 7 zusammengestellt. Die Bezeichnung der Atome sowie die Lage der Moleküle in der Elementarzelle zeigt Fig. 3 durch eine Projektion entlang der b-Achse. Die intramolekularen Abstände und Winkel des Thiophenringes entsprechen im wesentlichen den Resultaten an den

isomeren Dithienylen /25/. Das Molekül ist nahezu planar aufgebaut in Übereinstimmung mit den Folgerungen von Koßmehl und Mitarb. /2/. Die Abstände der S- bzw. C-Atome von einer Ausgleichsebene durch den Thiophenring liegen unterhalb von 0,005 Å. Nur das Atom C(5) hat einen Abstand von 0,03 Å von dieser Ebene durch C(2), C(5) und C(5') um einen Winkel von 3,2° gegen die Ringebene geneigt ist.

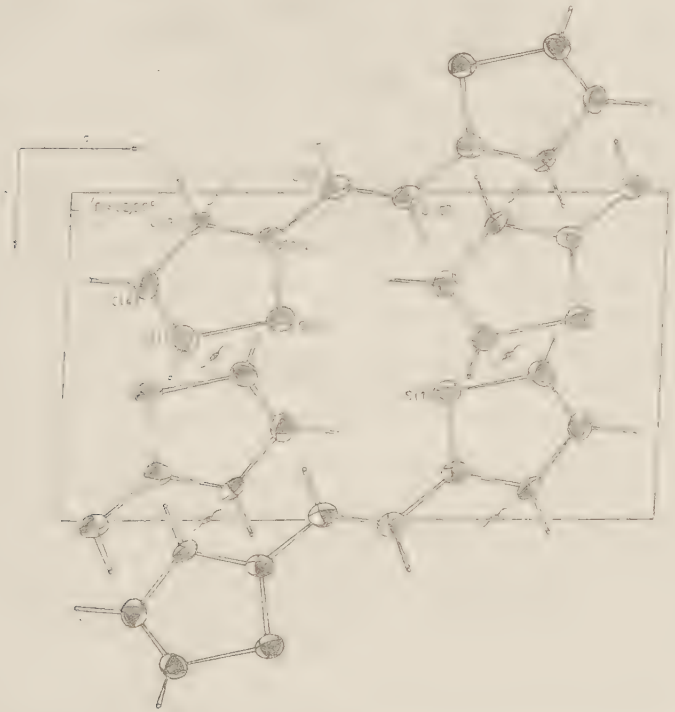


Fig. 3: Projektion des 1,2-Di-2-thienylethylens auf die a - c Ebene

Trotz Berücksichtigung der üblichen Korrekturen blieben einige Maxima von ca. 0,3 bis 0,6 $e\text{Å}^{-3}$ auf der Differenz-Fouriersynthese zurück.

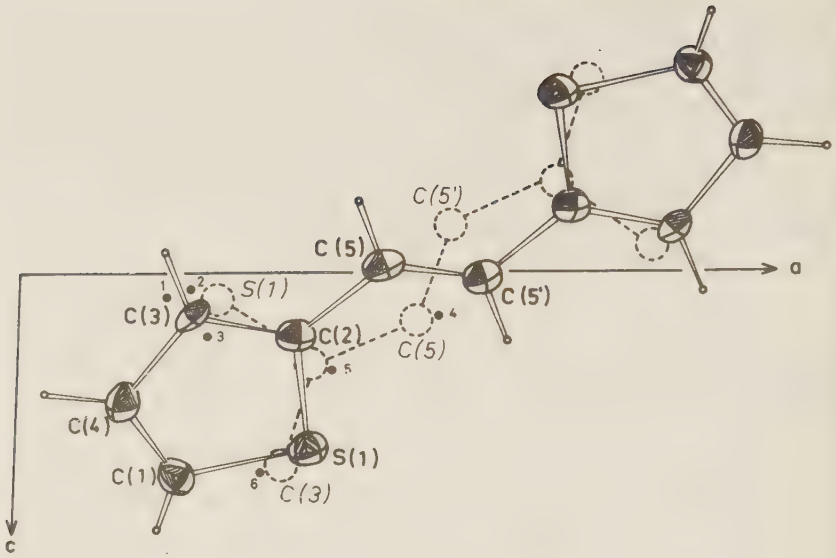


Fig. 4: Mögliches Fehlordnungsmodell

Die Lage der 5 stärksten Maxima (in Fig. 4 mit 1 bis 5 bezeichnet) zu den Atomen der asymmetrischen Einheit ließ die Vermutung einer gewissen Fehlordnung zu, wie sie bei analog gebauten Molekülen bereits gefunden wurde; z.B. am Stilben /26/, bei den isomeren Dithienylen /25/ oder am Azobenzol und p-Azotoluol /27, 29/, den N-analogen Strukturen.

Es wurde ein Modell gerechnet, wie in Fig. 4 gestrichelt angedeutet ist, wobei die Atome C(1) und C(4) ihre Lage praktisch nicht ändern. Es wurde also angenommen, daß etwa in jeder 10. Zelle das Molekül um seine Längsachse gedreht enthalten ist. Eine Verfeinerung ergab aber keine signifikante Verbesserung. Da die Qualität der Kristalle relativ schlecht war, war wohl das Datenmaterial zu ungenau, um Fehlordnungen, die nur mit geringer Häufigkeit auftreten, nachweisen zu können.

Keiner der intermolekularen Abstände ist kürzer als die übliche van der Waals-Länge.

Von den intermolekularen Abständen sind zu erwähnen:

S(1) - S(1')...3,800 (2) Å und S(1) - S(1")...4,664 (2) Å

5.3.2 Das 1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen

Weißenbergaufnahmen der z.T. gut ausgebildeten Kristalle zeigten eindeutige systematische Auslöschungen der Raumgruppe Pbca. Aufgrund der Dichte und des Elementarzellvolumens ergab sich ein Zellinhalt von 4 Formeleinheiten (II in Tab. 3). Nun besitzt das Molekül aber kein eigenes Symmetriezentrum, so daß mit je einem halben Molekül die acht Punktlagen der Raumgruppe Pbca besetzt werden könnten. Da das ein offensichtlicher Widerspruch ist, wurden weitere größere Kristalle mit Weißenbergtechnik untersucht. Dabei wurden die Filmaufnahmen z.T. auch erheblich länger als üblich belichtet, da eine Überstruktur vermutet wurde. In allen Fällen, bei denen es sich um einwandfreie Kristalle handelte (also keine Verwachsungen oder Zwillingsbildung durch Schneiden vorlagen) fielen die Untersuchungen negativ aus. Die auf dem AED z.T. mitvermessenen aufgrund der Raumgruppe Pbca ausgelöschten Reflexe bestätigten diese in vollem Umfang. Daraus resultierte der in Tab. 3 angegebene relativ große Anteil von über 16 % für die unbeobachteten Reflexe.

Daraufhin wurde die übliche Datenkorrektur vorgenommen und die statistische Verteilung der normalisierten Strukturfaktoren E aufgestellt. Diese bestätigte in eindeutiger Weise das Vorhandensein eines Symmetriezentrums. Dann wurde mit dem MULTAN-Programm /11/ der Versuch unternommen, die Struktur in der Raumgruppe Pbca zu lösen. In einer vom Programm ausgedruckten Elektronendichteverteilung ergaben die mit Abstand sechs größten Maxima in recht guter Näherung den Thiophenring, was auch nicht anders erwartet werden konnte. Mit diesen Daten wurde

eine Differenzfourier-Synthese gerechnet, wobei drei weitere, sich deutlich von den übrigen abhebende Maxima gefunden wurden. Die sich daraus ergebende Geometrie ist in Fig. 5a dargestellt.

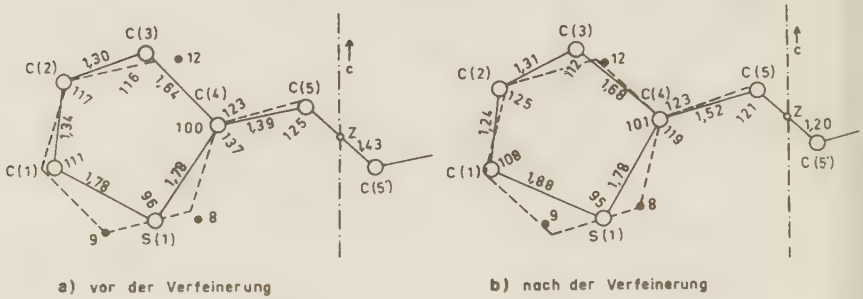


Fig. 5: Strukturmodell für 1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen

Da sowohl die Raumgruppe als auch die Gitterkonstanten und der Zellinhalt eindeutig feststanden, wurde ein Modell mit 50 %iger Punktlagenbesetzung verwendet. Für den realen Kristall bedeutet das, daß in jeder zweiten Zelle das Molekül (siehe Nr. II in Tab. 1) invertiert vorliegt, d.h. Thiophenring und Benzolring tauschen ihre Plätze. Allerdings darf das nicht systematisch der Fall sein, da sonst eine Überstruktur entstünde, z.B. mit Verdoppelung der entsprechenden Gitterachse, was zusätzliche systematische Reflexe zur Folge hätte.

Nach Fig. 5a war es verständlich, daß C(1), C(3), C(4) und C(5) von den entsprechenden Atomen des Benzolringes nicht zu trennen waren. Für C(3) ergab sich ein Abstand von 0,54 Å von dem analogen, während für die weiteren möglichen Benzolatome, hier mit 8 und 9 bezeichnet, Abstände von 0,63 bzw. 0,81 Å zum S(1) auftraten. Alle Atome wurden mit einem Populationsfaktor von PP = 0,5 versehen; das waren S(1), C(3) und die formalen Benzolatome 8, 9, 12.

Eine alleinige Verfeinerung des Populationsparameters bestätigte im wesentlichen die so angesetzte Besetzungsdichte. Eine erste Rückrechnung für die nur die Skalierungsfaktoren verfeinert wurden, ergab einen R-Wert von 32 %. Dann wurde bei festgehaltenen Ortsparametern der isotrope Temperaturfaktor verfeinert, was zu einem R-Wert von 24 % führte. Weitere isotrope, dann anisotrope Verfeinerung einschließlich freigegebener Ortsparameter führte zu einem R-Wert von 11,7 %. Dabei war nach etwa 5 Zyklen das Least-Squares-Verfahren bereits konvergent. Bis auf zwei Elektronendichtemaxima von 0,5 und 0,4 $e\text{Å}^{-3}$, die in der Gegend der noch fehlenden H-Atome lagen, wurden auf einer letzten Differenzfourier-Synthese keine weiteren Maxima größer als 0,25 $e\text{Å}^{-3}$ gefunden. Das Ergebnis ist in Fig. 5b dargestellt (Atomkoordinaten und Strukturfaktoren in Tab. 8 und 9) und unterscheidet sich vom Ausgangsmodell nicht wesentlich. Lediglich die Atome C(1), C(2) und C(3) sind mit den dort zu erwartenden Benzolatomen dichter zusammengedrückt, bei Verschlechterung der Thiophenringgeometrie, was auch kaum anders zu erwarten war. Die Abweichungen der Atome von einer Ausgleichsebene durch S(1) und C(1) bis C(5) waren alle < 0,007 Å, lediglich 8, 9, 12 lagen bei ca. 0,04 Å, was eine gute Planarität des Modells im Sinne der Erwartung entspricht.

Ebenso ergaben sich große Werte für die Hauptachsen der anisotropen Temperaturschwingungen, wobei jeweils die längste etwa in die Richtung des entsprechenden Benzolatoms zeigten (Tab. 8).

Um diese mathematische Koppelung im CRYLSQ-Verfahren zu beheben, wurde die Zentrosymmetrie aufgehoben und die Raumgruppe $P2_12_12_1$ verwendet. Das Verfahren zur Berechnung eines Modellvorschlages verlief ganz analog dem eben beschriebenen Weg. Es wurde ein sehr stark verzerrter Benzolring erhalten, der in guter Näherung mit den Lagen von C(1), C(2), 12, C(4), 8 und sehr grob mit 9 des Modells nach Fig. 5b zur Deckung kam, wenn man die Zentrosymmetrie bezüglich Z anwandte. Wegen der in groben Zügen mit obigen Modell übereinstimmenden Ergebnisse sei hier auf eine genaue Beschreibung des zweiten Falls verzichtet.

Bei sehr gutem Streuvermögen des Kristalls hätte der Versuch unternommen werden können, mit kürzerer Wellenlänge (z.B. Silberstrahlung mit λ = 0,559 Å) und bei tiefen Temperaturen die Reflexdaten zu vermessen, um eine höhere Auflösung zu erzielen. Leider war das Streuvermögen der Kristalle nicht geeignet dafür.

Trotz dieses sehr groben Modells und der kristallographisch etwas unbefriedigenden Ergebnisse können einige für den möglichen Leitungsmechanismus wichtige Aussagen gemacht werden. So ist die für die Durchkonjugation des gesamten π-Elektronensystems wichtige zentrale Doppelbindung mit 1,20 Å selbst bei Berücksichtigung der dreifachen Standardabweichung (≈ 0,03 Å) noch erheblich kürzer als z.B. bei Struktur I in 5.3.1. Der kürzeste intermolekulare Abstand für Schwefel wurde zu S(1)- S(1') = 4,10 Å bzw. S(1) - C(9') = 4,00 Å bestimmt.

5.3.3 Das 2,5-Bis(2-thienyl)thiophen

Systematische Auslöschungen auf Weißenbergaufnahmen ließen die beiden möglichen Raumgruppen $P2_1$ und $P2_1/m$ zu. Aus dem Elementarzellenvolumen und der nach der Schwebemethode bestimmten Dichte ergaben sich zwei Moleküle pro Elementarzelle. Nachdem die Intensitäten von 1477 Reflexen wie unter 5.2 vermessen und auf Nettointensitäten reduziert wurden, konnte mit Hilfe der unter 5.3 angegebenen statistischen Methoden eindeutig die Raumgruppe zu $P2_1$ festgelegt werden.

Da diese Struktur zeitlich als eine der letzten bearbeitet wurde, konnte das inzwischen zur Verfügung stehende MULTAN-Programm /11/ verwendet werden. Dieses Programm wählt selbständig geeignete Reflexe zur Festlegung des Nullpunktes sowie des Enantiomorphen aus dem Datensatz aus (siehe auch 4.).

Nach E-Normierung und Sigma-2 Berechnung wurden (mit Hilfe der Tangens-Formel, Gl. 17) die Phasen einer vorgegebenen Anzahl von Reflexen in 90° Schritten variiert und jeweils mit Hilfe der Tangensformel neue Phasen bestimmt. Mit einer Fast-Fourier-Transformation wird dann mit dem besten Phasensatz eine Elektronendichteverteilung berechnet und ausgedruckt. Für die hier vorgelegte Struktur wurden die Phasen von drei Reflexen zur Variation freigegeben und alle Reflexe mit $E \geq 1{,}4$ verwendet. Unter den 64 Startsätzen wurde nach Auswahlkriterien die Lösung gefunden, deren Elektronendichteverteilung bereits alle S- und C-Atome lieferte. Diese Atomlagen ergaben bei einer CRYSQ-Verfeinerung, bei der nur die Skalierungsfaktoren variiert wurden einen R-Wert von 22 %. Drei weitere Zyklen mit freigegebenen Atomlagen und isotropen Temperaturfaktoren ergaben einen R-Wert von 13,1 %. Nach weiteren drei Zyklen mit anisotropen Temperaturfaktoren wurde ein R-Wert von 11,2 % erreicht.

Aufgrund des relativ hohen Absorptionskoeffizienten (Tab. 3) wurde eine Absorptionskorrektur mit dem Programm ABSRB durchgeführt. Eine anschließende Verfeinerung ergab einen R-Wert von 9 %.

Einige niedrig indizierte Reflexe mit stark negativen ΔF-Werten ließ die Einführung und Verfeinerung eines Extinktionsparameters /23/ sinnvoll erscheinen. Für die meisten Reflexe mit einem ΔF-Wert von -6 bis -10 konnte dieser dann auf etwa -3 bis -4 gesenkt werden. Für drei Reflexe jedoch verblieb ein ΔF-Wert von -10 bis -18, so daß diese extinkt gesetzt und von der weiteren Verfeinerung vorläufig ausgeschlossen wurden. Mit Hilfe der Programme WTANAL und WTLSSQ /18/ wurde eine Bewichtungsanalyse durchgeführt. Dabei ergab sich eine systematische Korrelation des Mittelwertes von $\Sigma(|F_o|^2 - |F_c|^2)$ in Abhängigkeit von F_o und sin Θ. Es zeigte sich, daß ein quadratisches Polynom der Form $\sigma_x^2(F_o) = 3{,}0 + \sigma_x(F_o^2) + 3{,}0 \cdot F_o + 0{,}02\, F_o^2$ bereits eine gute Anpassung an die Korrelationskurve ergab. Sämtliche Reflexe, die weder extinkt gesetzt noch unbeobachtet waren, wurden mit $W = {}^1/\sigma_x(F_o)$ bewichtet. Nach Einführung dieser Korrekturen und weiteren CRYLSQ-Verfeinerungszyklen wurde ein R-Wert von 8,6 % erreicht. Auf einer anschließenden Differenz-Fourier-Synthese konnten dann trotz des relativ schlechten R-Wertes bereits 9 der insgesamt 12 H-Atome gefunden werden. Für die drei fehlenden H-Atome wurden die theoretischen Lagen eingegeben. Eine Verfeinerung bei festen isotropen Temperaturfaktoren zeigte, daß sich die Atome H(3), H(8) und H(14) nicht chemisch sinnvoll verfeinern ließen, d.h. diese Ladungsschwerpunkte wanderten in Richtung des entsprechenden C-Atoms auf eine Entfernung von 0,4 bis 0,6 Å hin. Diese H-Atome wurden daraufhin bei einem Abstand von 0,90 Å, dem für diese Struktur etwa mittleren C-H-Abstand festgehalten. Eine abschließenden Verfeinerung bei festen Temperaturfaktoren von $U = 5{,}0 \cdot 10^{-2}$ Å^2 für die H-Atome, entsprechend etwa dem mittleren isotropen Temperaturfaktor der C-Atome ergab dann einen abschließenden R-Wert von 7,7 %. Der Extinktionsparameter ergab sich zu $2{,}9\ (2) \cdot 10^{-4}$.

Die Bezeichnung der Atome sowie die Lage der Moleküle in der Elementarzelle zeigt Fig. 6 durch eine Projektion entlang der b-Achse. Die Atomkoordinaten, Bindungslängen und -winkel sowie die gemessenen und berechneten Strukturfaktoren sind in

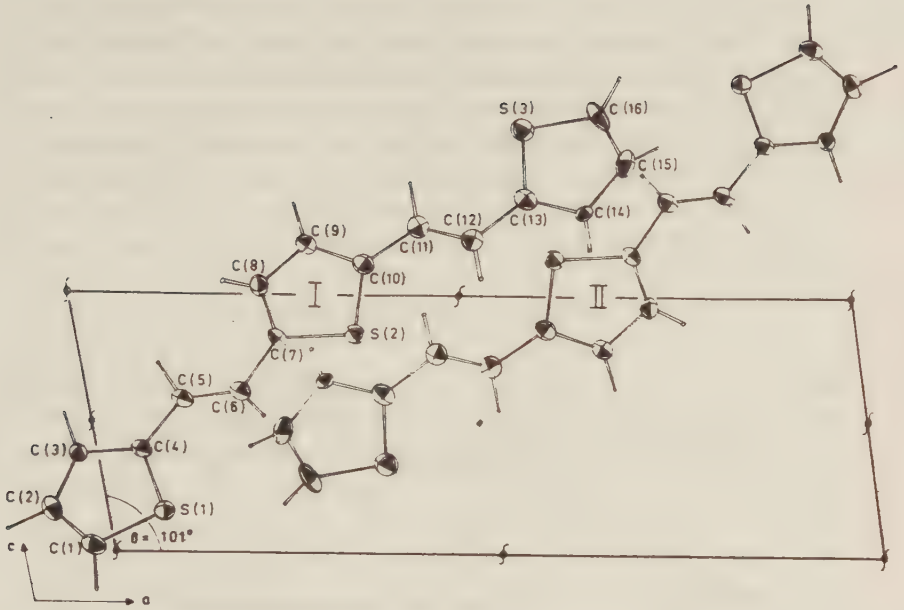


Fig. 6: Projektion des 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophens auf die a - c Ebene

den Tabellen 10, 11 und 12 zusammengestellt, wobei sich in Tab.11 die in der rechten und linken Spalte gegenüberstehenden Daten im Molekül entsprechen (vergl. auch Kap. 6). Auf einer letzten Differenz-Fourier-Synthese verblieben noch einige Maxima von 0,3 bis 0,6 e pro $Å^3$. Die Lage der vier stärksten Maxima ließ die Vermutung zu, daß eine geringe Fehlordnung vorlag, der Art, daß der Thiophenring mit dem S(3)-Atom und das Atom C(12) umgeklappt, d.h. um die Gerade C(10) - C(11) um 180^o gedreht in geringer Häufigkeit im Kristall vorliegt. Ein Modell, das diese Fehlordnung berücksichtigt, wurde gerechnet, ergab aber wie bei dem 1,2-Di-2-thienylethylen keine Verbesserung des R-Wertes oder der Standardabweichungen. Die Verfeinerung der isotropen Temperaturfaktoren brachte nur eine Verbesserung

des R-Wertes von 7,7 % auf 7,6 %. Der Hamilton-Test /13/ zeigte, daß die Hinzunahme dieser Parameter keine signifikante Verbesserung darstellte, so daß dies unterblieb. Das gesamte Molekül ist in sehr guter Näherung koplanar gebaut /2/ mit maximalen Abweichungen von einer Ausgleichsebene von -0,06 Å für S(2), +0,05 Å für S(3) und 0,03 Å für S(1). Dadurch ergeben sich Winkel von $\pm$ 1,6°, um die die beiden endständigen Thiophenringe aus der Ausgleichsebene herausgedreht sind, während es für den mittleren Ring 2,2° sind (siehe Fig. 7).

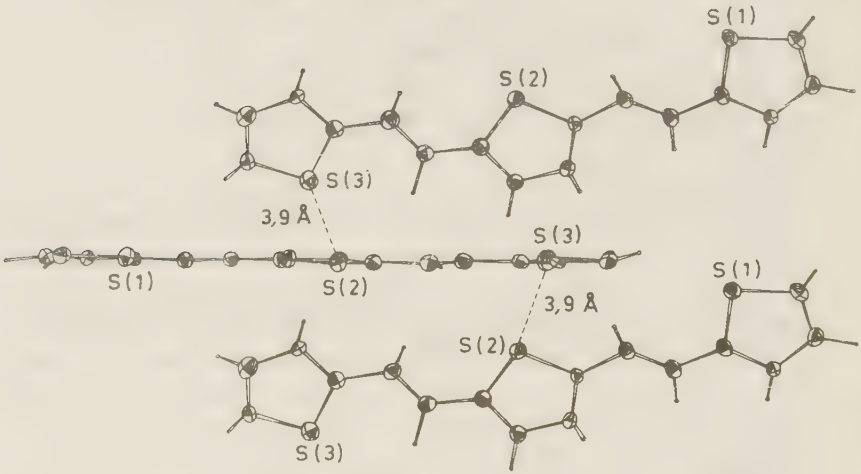


Fig. 7: Projektion von 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophen-Molekülen entlang der ungefähren Richtung (321)

Von den intermolekularen Abständen ist zu erwähnen:

S(2) - S(3) ...3,94 Å ; S(1) - C(2) ...3,58 Å
S(2) - C(14)...3,92 Å ; S(1) - S(1')...4,68 Å
S(1) - S(3) ...5,18 Å

Das Molekül besitzt zwar kein Symmetriezentrum, ist aber so gut koplanar aufgebaut, daß Bild und Spiegelbild in Bezug auf die Molekülebene in guter Näherung übereinstimmen, denkt man sich das Molekül in einer Spiegelebene liegend. Demzufolge ergab die Berücksichtigung des negativen Imaginäranteils gegenüber dem positiven bei der anomalen Dispersionskorrektur /24/ für Schwefel keine Änderung im R-Wert.

5.3.4 Das 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol

Filmaufnahmen ließen aufgrund der systematischen Auslöschungen die möglichen Raumgruppen $P2_1$ bzw. $P2_1/m$ zu. Datensammlung und -reduktion siehe 5., die kristallographischen Daten siehe Tab. 3, Verbindung IV.

Die statistische Größenverteilung der Intensitäten und der daraus berechneten E-Werte wiesen eindeutig azentrisches Verhalten auf, so daß nur die Raumgruppe $P2_1$ in Frage kam. Nach Festlegung des Nullpunktes durch drei geeignete Reflexe und deren Phase wurden zwei weitere Reflexe mit variablen Phasen in den Startsatz für die Tangens-Iteration zur Bestimmung neuer Phasen eingegeben. In diesen 16 Möglichkeiten (2 Reflexe mit jeweils 4 verschiedenen, um 90° unterschiedlichen Phasensätzen) war bereits die Lösung enthalten, deren Elektronendichteverteilung die beiden Schwefel- und 12 Kohlenstofflagen ergab. Mit diesen Daten wurde eine CRYLSQ-Verfeinerung angesetzt, welche bei festgehaltener y-Koordinate des Atoms S(1) nach 4 Zyklen einen R-Wert von 21, 7 % lieferte. In einer anschließenden Differenz-Fourier-Synthese konnten alle noch fehlenden Kohlenstofflagen gefunden werden. Erst isotrope, dann anisotrope CRYLSQ-Verfeinerung ergab einen R-Wert von 7,3 %. Es wurde eine Absorptionskorrektur angebracht und eine Dispersionskorrektur für Schwefel /24/ eingeführt. Die weitere Verfeinerung ergab dann einen R-Wert von 6,6 %. Daraufhin konnten dann in einer Differenz-Fourier-Synthese zunächst alle Wasser-

stofflagen gefunden werden. Die Hinzunahme der H-Atome bei isotropen Temperaturfaktoren ergab einen R-Wert von 4,7 %. Aufgrund einiger niedrig indizierter Reflexe mit stark negativen ΔF-Werten (-6 bis -30) wurde dann ein Extinktionsparameter zur Verfeinerung hinzugenommen. Daraufhin wurden bei einem R-Wert von 4,5 % maximale ΔF-Werte von -2,4 gefunden. Lediglich der ΔF-Wert des Reflexes 020 wurde mit ΔF = -28,2 nur unwesentlich verändert, so daß dieser das Gewicht W = 0 erhielt. Eine Verfeinerung bei freigegebenen isotropen H-Parametern zeigte, daß die Wassserstoffatome H(10) und H(16) sich chemisch nicht sinnvoll verfeinern ließen. Ihre Parameter wurden daraufhin bei den ursprünglichen Werten festgehalten. Es ergab sich ein R-Wert von 4,1 %, welcher mit Hilfe des Hamilton-Tests /13/ als signifikante Verbesserung gegenüber dem Modell mit festen H-Parametern eingestuft werden konnte. An dieser Stelle wurde eine Bewichtung für alle beobachteten Reflexe eingeführt nach $W = 1/\sigma_x^2 (F_o)$ mit $\sigma_x^2 (F_o) = A + \sigma_x (F_o^2) + F_o + E F_o^2$, mit den Parametern A = 2,4 und E = 0,02. Alle unbeobachteten Reflexe wurden mit dem Gewicht W = 0 versehen. Der abschließende R-Wert war damit R = 4,3 % und der bewichtete, nach Gl. 24, R_w = 6,0 %. Der Extinktionsparameter /23/ ergab sich zu 3,0 (3) · 10^{-4}. Die endgültigen Atomparameter zeigt Tab. 13. Tab. 14 zeigt die Bindungslängen und -winkel der Atome, wobei sich die in der rechten und linken Spalte gegenüberstehenden Daten im Molekül entsprechen. Die Strukturfaktoren sind in Tab. 15 zu finden.

Eine letzte Differenz-Fourier-Synthese zeigte Restmaxima von unter 0,2 Elektronen pro $Å^3$. Lediglich in den Gebieten zwischen C(10) und H(10) bzw. C(16) und H(16) waren je ein recht diffuses Maximum von 0,3 bzw. 0,4 Elektronen pro $Å^3$ zu finden. Da das Molekül wegen der unterschiedlichen Abweichung der Thiophenringe von der Koplanarität nicht mehr wie bei Nr. I in 5.1 und Nr. II in 5.3 mit seinem Spiegelbild in guter Näherung gleich ist, konnte wegen der anomalen Dispersion des Schwefels eine Aussage über die absolute Konfiguration gemacht

werden ohne Bijvoet-Reflexpaare zu messen /28/. Es wurde ein Modell mit invertierten y-Koordinaten gerechnet, welches bei sonst gleichen Parametern zu einem unbewichteten R-Wert von 4,8 % führte. Der Hamilton-Test /13/ zeigte eindeutig, daß dieses Modell mindestens mit 99,5 % Wahrscheinlichkeit auszuschließen war.

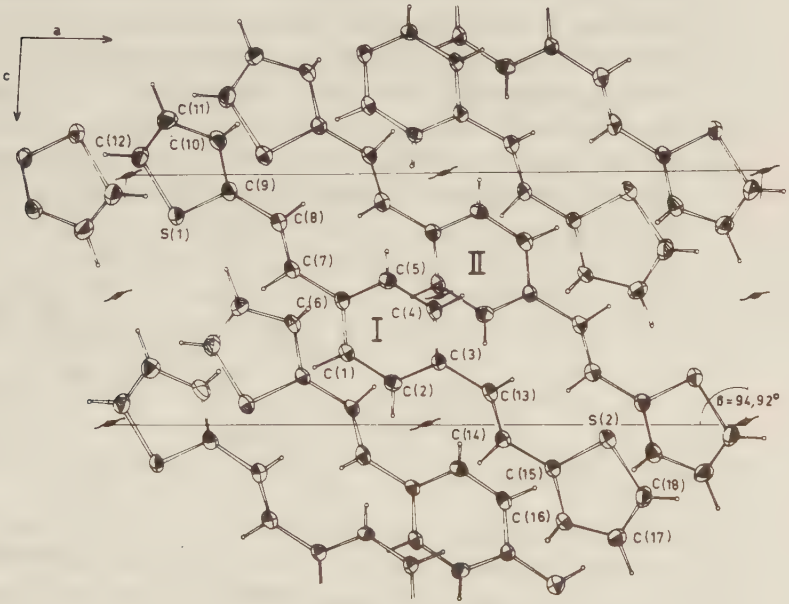


Fig. 8: Projektion mehrerer Moleküle des 1,4-Bis(2-thienyl=vinyl)benzols entlang der b-Achse

Die Lage der Moleküle zueinander im Kristall sowie die Bezeichnung der Atome zeigt Fig. 8, wobei Molekül II in y-Richtung um $\frac{1}{2}$ höher (bzw. tiefer) als I liegt.

Die intramolekularen Abstände und Winkel in den Thiophenringen entsprechen im wesentlichen den Werten bei den drei Isomeren des Dithienyls /25/ und dem Dithienylethylens (5.3.1). Bei den

Vinylenbrücken liegt dagegen im Vergleich zu diesem bereits ein stärkerer Bindungslängenausgleich vor (1,308 gegenüber 1,331 bzw. 1,340 Å), wie durch die koplanare polykonjugierte π-Elektronenanordnung erklärbar ist. Der Benzolring und die Thiophenringe sind planar aufgebaut, wie es Koßmehl, Härtel & Manecke /2/ aufgrund spektroskopischer Untersuchungen erwarteten. Es wurden maximale Abweichungen von einer Ausgleichsebene durch den Benzolring von -0,2 bis 0,3 Å für C-Atome an den Molekülenden gefunden. Die Ausgleichsebenen durch die Thiophenringe sind daher um 5,7° bzw. -6,7° zur Benzolringebene geneigt, während sie relativ zueinander um 7,0° um die Molekülläng sachse verdreht sind. Fig. 9 veranschaulicht diesen Sachverhalt durch eine Projektion entlang der ungefähren Richtung (321).

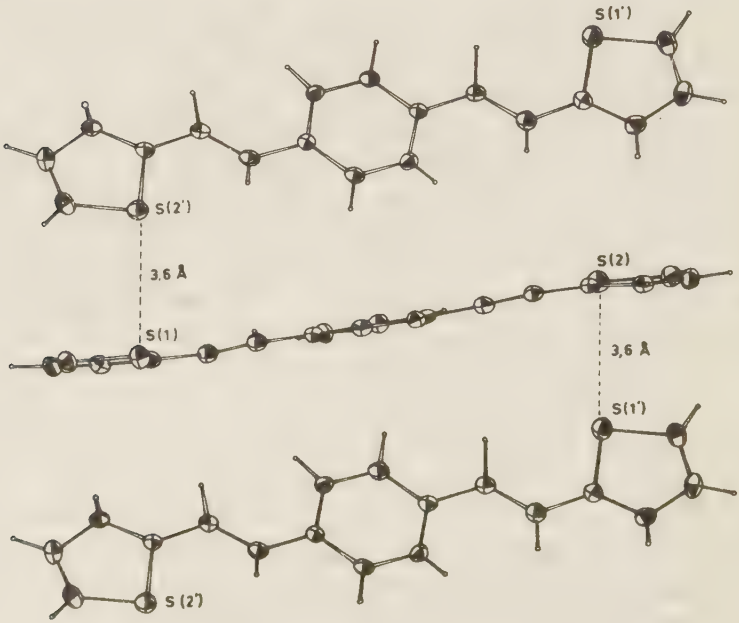


Fig. 9: Projektion von 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol-Molekülen entlang der ungefähren Richtung (321)

In diesem Bild ist ebenfalls der kürzeste intermolekulare Abstand zwischen den Schwefelatomen S(1) des einen und S(2') des anderen Moleküls von 3,605 (1) Å gut erkennbar, der damit noch um fast 0,1 Å kürzer ist als das Doppelte des Van der Waals-Radius für Schwefel (Kristallradius für S^{2-}) mit 3,68 Å /30/. So ist an dieser und der entsprechenden Stelle S(2) - S(1') wohl die für dieses System größte intermolekulare Wechselwirkung zu erwarten. Diese wird verstärkt durch die Tatsache, daß bei dem an sich koplanaren System die Thiophenringe in der Weise leicht abgewinkelt und gedreht sind (Fig. 9), daß eine Verringerung des Abstandes S(1) - S(2') bzw. S(2) - S(1') zustandekommt. Die nächst kürzesten Abstände sind:

C(12) - C(18') = 3,80 Å ; C(4) - C(4') = 3,88 Å

S(2) - C(10') = 3,98 Å ; S(1) - S(1'') = 4,79 Å

Dabei gehört S(1'') zu dem, bezüglich der Schraubenachse durch den Ursprung, symmetriebezogenen Molekül.

5.3.5 Das 2,5-Distyrylthiophen

Die Bestimmung der Gitterkonstanten sowie der Dichte dieser Verbindung geschah wieder mit der Filmaufnahmetechnik bzw. der Schwebemethode wie sie bei den vorigen Strukturen beschrieben wurden. Die Daten dazu siehe Tab. 3, Struktur Nr. V. Weißenbergaufnahmen führten auf die Raumgruppe $P2_12_12_1$, wobei das Fehlen eines Symmetriezentrums zusätzlich durch die Größenverteilung der normalisierten Strukturfaktoren E bestätigt wurde. Mit Hilfe des Programms SINGEN wurden 60 Reflexe mit den größten E-Werten sowie deren Triplet-Beziehungen aufgesucht. Dann wurden unter Berücksichtigung der Regeln der Symbolischen Addition drei Reflexe zur Definition des Nullpunktes und ein weiterer zur Festlegung des Enantiomorphen ausgewählt. Drei weitere Reflexe wurden zum Startsatz hinzugenommen. Da es sich um zweidimensionale Reflexe handelte, waren deren Phasen aufgrund der vorliegenden Raumgruppe zu $0^o/180^o$ bzw. $90^o/270^o$ beschränkt.

Für diese 8 verschiedenen Startsätze wurden dann weitere Phasen über die Tangensformel /17/ mit dem Programm TANGEN errechnet. Eine Elektronendichteverteilung unter Verwendung der Phasen dieser Tangensiteration lieferte Elektronendichtemaxima, die gut als Thiophenring, eine Vinylenbrücke und ein Benzolring interpretiert werden konnten. Eine erste Rückrechnung ergab einen R-Wert von 37 %. In einer anschließenden Differenzfourier-Synthese konnten bereits alle noch fehlenden C-Atome gefunden werden. Dann wurden drei Zyklen CRYLSQ-Verfeinerung mit isotropen Temperaturfaktoren gerechnet, welche bereits zu einem R-Wert von 9,7 % führten. Damit war die Struktur bezüglich der Nicht-Wasserstoff-Atome als gelöst anzusehen. Der Übergang von isotropen zu anisotropen Temperaturfaktoren führte zu einem R-Wert von 7,4 %. In einer Differenzfourier-Synthese konnten dann ohne Schwierigkeiten alle H-Atome gefunden werden, deren isotrope Einbeziehung in die weitere Verfeinerung zu einem konvergenten R-Wert von 6,6 % führte. Dabei ergaben sich allerdings für vier H-Atome zu große Bindungslängen von ca. 1,38 Å, so daß diese zunächst bei ihren ursprünglichen Werten festgehalten wurden. Für Schwefel wurden Korrekturwerte zu anomalen Dispersion /24/ eingeführt. Daraufhin wurde ein R-Wert von 7,0 % erzielt. Bei Verwendung der Dispersionskorrektur mit negativem Imaginäranteil ergab sich ein R-Wert von 6,3 %. Der Hamilton-Test /13/ zeigte, daß das bei einer Wahrscheinlichkeit von mindestens 99,5 % eine signifikante Verbesserung war. Das bedeutet, daß die absolute Konfiguration /29/ bezüglich der internationalen Festlegung die invertierte war. Bei der hier vorliegenden Raumgruppe genügte es dann, eine Koordinate zu invertieren, hier war es die y-Koordinate aller Atome, um das rechts-Molekül zu erhalten.

Mit Hilfe des Programms ABSORB /18/ konnte aufgrund der vermessenen Gestalt des verwendeten Kristalls eine Absorptionskorrektur angebracht werden. Diese absorptionskorrigierten Intensitäten wurden für weitere drei Zyklen CRYSLQ-Verfeinerung verwendet, wobei zusätzlich ein Extinktionsparameter /23/ freigegeben wurde. Nun wurden auch die vier festgehaltenen H-

Atome wieder zur Verfeinerung freigegeben und es zeigte sich, daß diese jetzt chemisch sinnvoll verfeinert werden konnten. Ein abschließender R-Wert von 5,0 % wurde erreicht. Ferner zeigte sich, daß die Einführung des Extinktionsparameters sinnvoll war, da bei mehreren Reflexen der ΔF-Wert von -10 bis -18 auf -3 bis -4 verringert wurde. Lediglich drei Reflexe zeigten noch einen größeren negativen ΔF-Wert von mehr als 10, so daß diese das Gewicht W = 0 erhielten. Mit den Programmen WTANAL und WTLSSQ /18/ wurde eine Bewichtungsanalyse durchgeführt. Dabei ergab sich wieder wie bei den vorhergegangenen Strukturen eine systematische Korrelation des Mittelwertes von $\Sigma(F_o^2 - F_c^2)$ für Gruppen mit steigendem F_o von jeweils ca. 100 Reflexen in Abhängigkeit von F_o bzw. sin θ. Die erhaltene Kurve ließ sich durch ein quadratisches Polynom der Form $\sigma_x^2 = 3{,}42 + \sigma_x (F_o^2) + 3{,}0 \cdot F_o + 0{,}01\, F_o^2$ bereits gut annähern. Nach Anwendung der Bewichtung unterschieden sich die mittleren bewichteten $(F_o^2 - F_c^2)$-Werte der einzelnen Gruppen um weniger als den Faktor 2, während es unbewichtet fast der Faktor 20 war. Alle beobachteten Reflexe erhielten somit das Gewicht: $W = \frac{1}{\sigma_x(F_o)}$. Eine letzte Verfeinerung unter Verwendung dieser Bewichtung ergab dann einen abschließenden R-Wert von 5,0 % und einen bewichteten R-Wert von 7,4 % bei etwas besseren Standardabweichungen der Atomparameter. Eine letzte Differenzfourier-Synthese zeigt bis auf zwei Maxima von ca. 0,3 $e\text{Å}^{-3}$ keine weiteren Maxima über 0,2 $e\text{Å}^{-3}$.

Der Bau des Moleküls sowie die Bezeichnung der Atome ist in Fig. 10 dargestellt. Tab. 16 und 17 im Anhang enthalten die Atomparameter sowie die Moleküldaten, Tab. 18 die Strukturfaktoren F_o und F_c. Der Extinktionsparameter ergab sich zu $2{,}2\ (2) \cdot 10^{-4}$.

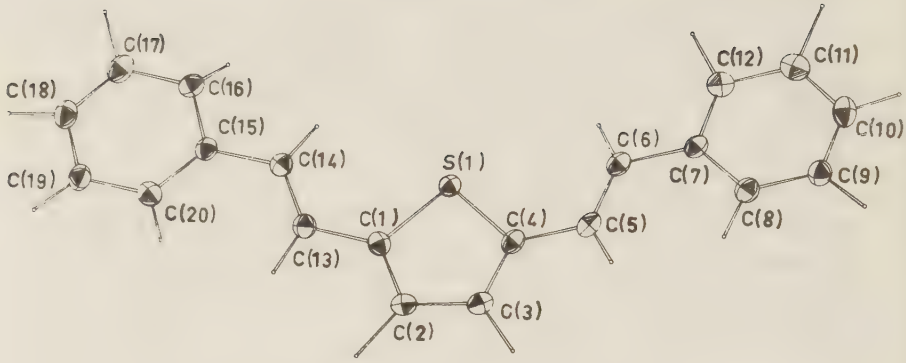


Fig. 10: Moleküldarstellung des 2,5-Distyrylthiophens

Ausgleichsebenen durch die drei Ringe ergaben maximal Abweichungen von jeweils:

für den Thiophenring: 0,010 Å
" " C(7) - C(12) - Benzolring: 0,014 Å
" " C(15)- C(20) - " : 0,006 Å

für C(8) und C(20) in Bezug auf die Ebene durch den Thiophenring: 0,3 Å.

Das bedeutet, daß die Benzolringe jeweils um ca. 2,1° im gleichen Sinn gegen die Thiophenebenen gedreht sind und zwar ungefähr um die Gerade C(7) - C(10) bzw. C(15) - C(18).

Bemerkenswert kurze intermolekulare Abstände wurden hier nicht gefunden. Es sei aber bereits an dieser Stelle erwähnt, daß der kürzeste S-S-Abstand zu 5,74 Å gefunden wurde, also zu dem identischen Molekül eine Gitterlänge in c-Richtung entfernt.

5.4 Ergebnisse der Strukturanalysen

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß alle hier untersuchten Verbindungen trotz maximaler Verdrehung der Thiophenringe von 7,0° beim 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol (Fig. 9) in guter Näherung als planar anzusehen sind. Da es sich hier stets um konjugierte Doppelbindungssysteme handelt, bei denen die π-Elektronen-Orbitale maximal Wechselwirkungen besitzen, wenn sie parallel zueinander stehen, war das auch zu erwarten. Das steht in guter Übereinstimmung mit den elektronischen Spektren von Koßmehl und Mitarb. /2/. Vergleicht man die zentralen Vinylenbrücken zwischen den Ringen miteinander, so ist folgendes zu sagen: bei dem 1,2-Di-2-thienylethylen ist die Doppelbindung mit 1,309 Å im Vergleich zu 1,337 Å (z.B. beim Ethylen) bereits leicht in Richtung höherer Bindungsordnung verkürzt. Ähnliche Eigenschaften sind beim analog gebauten Stilben /26/ ebenfalls gefunden worden.

Dagegen findet bei den längeren Molekülen III, IV und V bereits ein deutlicher Bindungslängenausgleich statt, besonders bei dem 2,5-Bis(2-thienylvinyl)benzol (IV) mit 1,34 Å bzw. 1,33 Å, wie er auch für das 2,5-Distyrylpyrazin /31/ gefunden wurde. Dagegen ist bei Verbindung III die eine Brücke von C(5) nach C(6) selbst bei Berücksichtigung der Standardabweichung mit 1,30 Å deutlich kürzer als die andere mit 1,33 Å. Diese Bindungslängen werden uns noch bei der Diskussion der elektrischen Leitfähigkeit beschäftigen.

Die Benzolringe zeigen einen gewissen Grad von Verzerrung, wie er für mono- bzw. para-disubstituierte Benzolderivate zu erwarten ist aufgrund von Vergleichen von Domenicano, Vaciago und Coulson /32/ an einer sehr großen Anzahl entsprechender Verbindungen. Demnach sind die Winkel an demjenigen Atom, an dem der Substituent sitzt, mit Werten von 116,6° bis 117,7° systematisch etwas kleiner als die 120° des freien Benzols. Ein ziemlich ähnliches Verhalten findet man beim Vergleich der entsprechenden Winkel an der substituierten Stelle der Thiophenringe. Mit 110° bis 111° sind sie durchschnittlich um ca.

1° bis 2° kleiner als die $112{,}6^{\circ}$ für das unsubstituierte Thiophen /33/. Da der Thiophenring in Bezug auf seine aromatischen Eigenschaften stark dem Benzol ähnelt, mag auch hier die Änderung im Hybridisierungszustand des substituierten C-Atoms liegen, wie es für den Benzolring angenommen wird /32/.

An dieser Stelle sei noch eine Besonderheit zu erwähnen, die bei allen hier untersuchten Strukturen beobachtet werden konnte, mit Ausnahme von II und V. Das H-Atom, welches jeweils am C-Atom der Position 2 bzw. 3 der endständig gebundenen Thiophenringe ist, ließ sich nicht verfeinern. In Struktur I ist es H(3), in II H(3) bzw. H(14) und in IV H(10) bzw. H(16). Das bedeutete, daß zwar in den meisten Fällen auf einer Differenzfourier-Synthese jeweils chemisch sinnvoll interpretierbare Maxima an entsprechender Stelle gefunden wurden, deren Lage aber bei CRYLSQ-Verfeinerungen auf 0,6 bis 0,4 Å (je nach Struktur) an das C-Atom heranrückten unter Beibehaltung vernünftiger Bindungswinkel. Dieser Effekt wurde ebenfalls für das 1,4-Di (2-thienyl)-1,3-butadien von Buschmann /34/ gefunden. Denkt man an ein Fehlordnungsmodell, wie es für Struktur I in Fig. 4 vorgeschlagen wurde, wäre dieser Effekt durch die dort noch vorhandene Restelektronendichte deutbar. Da aber die hier erreichte Genauigkeit der Strukturen nicht ausreichte, solch detailierte Aussagen zu verifizieren, wurden die betroffenen H-Atome, wie bei der Beschreibung der einzelnen Strukturen schon erwähnt, auf ihrer ursprünglichen Lage festgehalten.

Schon bei der Beschreibung der einzelnen Strukturen wurde auf die kürzesten intermolekularen Abstände hingewiesen. Da der Schwefel mit einem Wert von 3,68 Å für den doppelten Van der Waals-Radius /30/ am ehesten intermolekulare Wechselwirkungen erwarten läßt und H-Brücken nicht zu erwarten sind, sollen hier noch einmal die kürzesten S-S-Abstände der einzelnen Strukturen zusammengestellt werden (in Å):

I

S(1) - S(1') = 3,80 Å

II

S(1) - S(1') = 4,10 Å

S(1) - C(9') = 4,00 "

III

S(2) - S(3) = 3,94 "

S(1) - S(1) = 4,68 "

S(1) - S(3) = 5,18 "

IV

S(1) - S(2) = 3,61 "

S(1) - S(1) = 4,79 "

V

S(1) - S(1') = 5,74 "

In Fig. 11 bis Fig. 15 ist dieser Sachverhalt durch Darstellung mehrerer Moleküle in der ungefähren a-b-Ebene veranschaulicht.

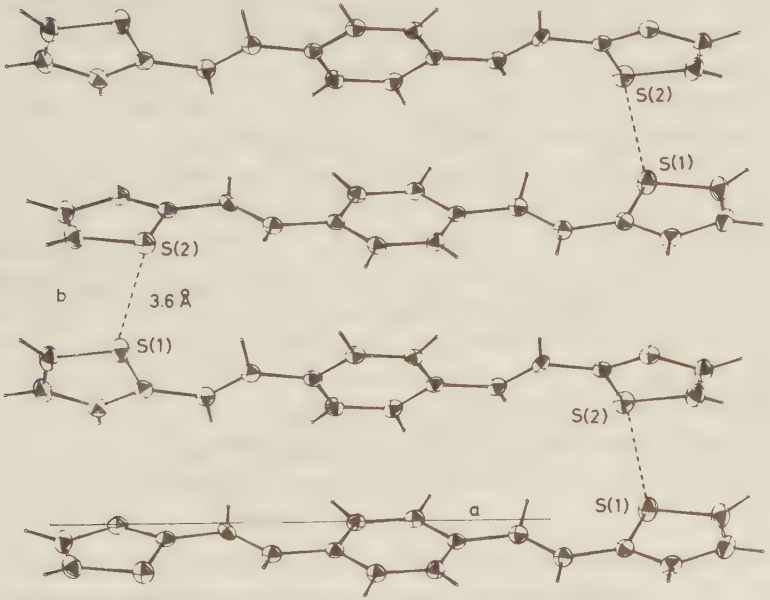


Fig. 11: Projektion von 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol-Molekülen entlang der ungefähren Richtung (210)

Bei dem 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzol (IV) in Fig. 11 sehen wir eine größere Wechselwirkung durch den relativ kurzen Abstand von Atom S(1) des einen zum Atom S(2) des nächsten Moleküls. Diese Wechselwirkung wird eine Überlappung der π-Elektronenorbitale sein, so daß dort Elektronenübergänge möglich sind. Das durchkonjugierte Molekül bietet keine größere Potentialbarriere, und am anderen Ende finden die Elektronen bei S(1) und S(2) wieder die Übergangsmöglichkeit zum Nachbarmolekül.

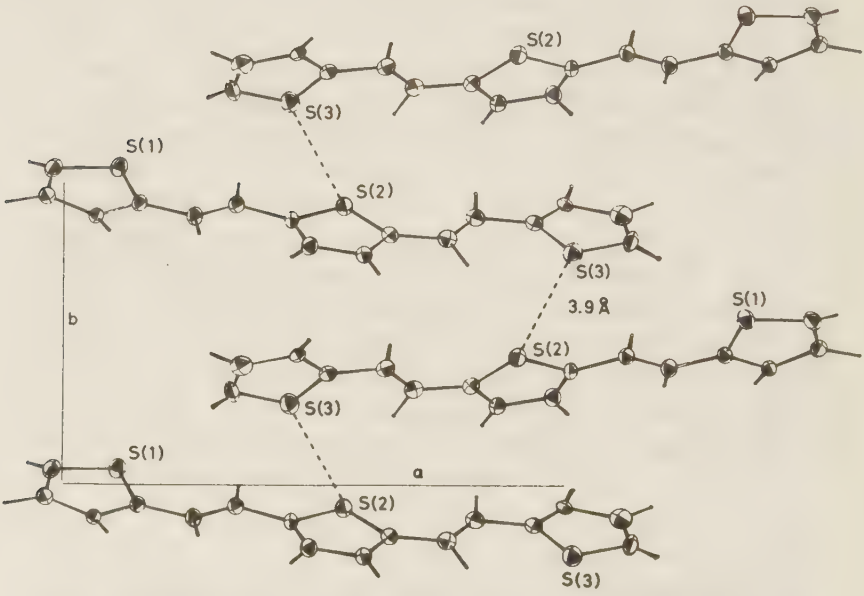


Fig. 12: Projektion von 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophen-Molekülen entlang der ungefähren Richtung (310)

Dieses Wechselspiel: „Molekülleitung" hin, Übergangsmöglichkeit S(1) - S(2), „Molekülleitung" zurück, Übergang usw. verläuft im Mittel längs paralleler Geraden in einer Richtung irgendwie diagonal in der b-c-Ebene. Diese Geraden werden durch den gesamten Kristall verlaufen, sofern keine Fehlordnungen wie z.B. Versetzungen diese Geraden unterbrechen. In a-Richtung wäre ein Übergang von S(1) zu S(1') des nächsten Moleküls möglich, doch ist hier der Abstand mit 4,79 Å deutlich größer und die Übergangswahrscheinlichkeit wird wesentlich geringer sein.

Bei dem 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophen (III, Fig. 12) liegt ein qualitativ sehr ähnliches Verhalten vor. Auch hier werden Elektronenübergangsmöglichkeiten von S(2) zu S(3) des Nachbarmoleküls durch Orbitalüberlappung möglich, die wieder gemittelt als Geraden in Diagonalrichtung in der ungefähren b-c-Ebene verlaufen. Hier allerdings verläuft die „Molekülleitung" offensichtlich nicht durch das gesamte Molekül sondern nur durch den Teil zwischen S(2) und S(3). Dieser Teil besitzt die Vinylbrücke mit 1,33 Å, welche bereits einen besseren Bindungslängenausgleich gegenüber der zu S(1) - S(2) gehörenden mit 1,30 Å darstellt. Welche Kristallkräfte auf das Molekül einwirken, daß es hier die beschriebene Geometrie annimmt, läßt sich hier natürlich nicht sagen. Es ist aber zu erwarten, daß sich die Elektronen bevorzugt in Richtung der kleinsten Potentialbarrieren bewegen werden. In a-Richtung wäre dann ein Übergang von S(1) zu S(1') des in Fig. 11 nicht mehr gezeichneten Nachbarmoleküls möglich, bei einem Abstand von 4,68 Å.

Für das 2,5-Distyrylthiophen (V in Fig. 13) liegen die Verhältnisse dagegen völlig anders. Dieses Molekül besitzt keine endständigen Thiophenringe und das S-Atom wird hier zudem noch etwas von den beiden Benzolringen umgeben. Der kürzeste S-S-Abstand ist hier lediglich 5,74 Å zu dem identischen Molekül in der nächsten Zelle, d.h. eine c-Gitterlänge weiter.

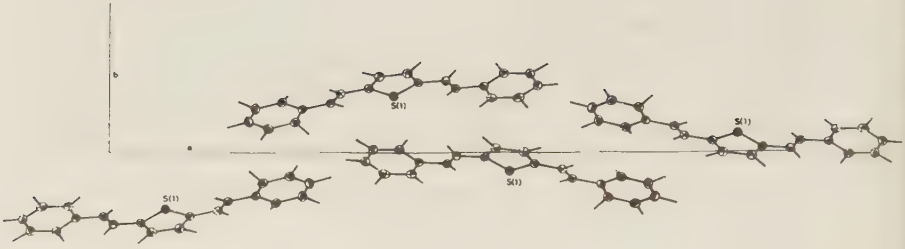


Fig. 13: Projektion von 2,5-Distyrylthiophen-Moelkülen entlang der Richtung (110)

Für das 1,2-Di-2-thienylethylen (I) in Fig. 14 findet man die kürzesten S-S-Abstände von 3,80 Å zwischen S(1) des einen und S(1') des zweiten zentrosymmetrisch bezüglich des Inversionszentrums in $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$ dazu liegenden Moleküls (Molekül I in Fig. 14). Man erhält hier mögliche Elektronenübergänge durch Orbitalüberlappung, deren Richtung, über die Zellen gemittelt, Geraden ergeben, die in c-Richtung verlaufen. Das Gleiche gilt für die Molekülllagen II, die gegenüber I nur um $\frac{1}{2}$ in y-Richtung versetzt verlaufen. Danach kann in c-Richtung eine höhere Leitfähigkeit erwartet werden als in a- bzw. b-Richtung. In diesen Richtungen stehen für mögliche Elektronenübergänge zwischen S-Atomen Abstände von 4,66 Å zur Verfügung (Fig. 15), was bereits eine erhebliche Verringerung der möglichen Orbitalüberlappung darstellen dürfte.

Zum Schluß sei noch das 1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen erwähnt, für welches trotz der ungenauen Strukturaufklärung (vergl. 5.3.2) einige Voraussagen gemacht werden können. Es liegen hier eine stark verkürzte zentrale Doppelbindung und etwas

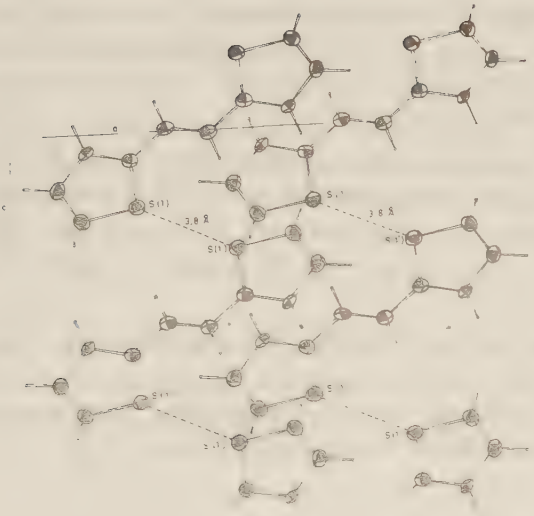


Fig. 14:
Projektion der 1,2-Di-2-thienylethylen-Moleküle auf die a - c - Ebene

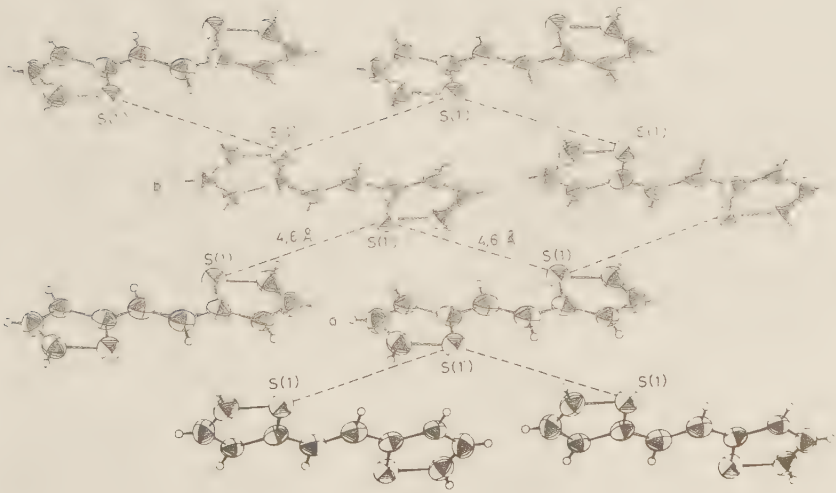


Fig. 15: Projektion mehrerer Moleküle des 1,2-Di-2-thienylethylen auf die a - b - Ebene

größere intermolekulare S-S-Abstände vor als bei Verbindung I. Da ferner ein als möglicher Elektronendonator wirkendes S-Atom weniger als bei I vorhanden ist, sollte eine wesentlich geringere elektrische Leitfähigkeit als für das 1,2-Di-2-thienylethylen (I) zu erwarten sein.

Diese Erkenntnisse lassen die Schlußfolgerung zu, daß bei Verbindung III und IV die elektrische Leitfähigkeit in Richtung der b- bzw. c-Achse größer sein müßte als in a-Richtung. Bei Verbindung II sollte recht genau in c-Richtung die größte Leitfähigkeit zu messen sein.

Durch Messung der anisotropen elektrischen Leitfähigkeit werden diese aufgrund von röntgenkristallstrukturanalytischen Ergebnissen gemachten Aussagen über den möglichen Ladungsträgertransport durch den Festkörper nachzuprüfen sein.

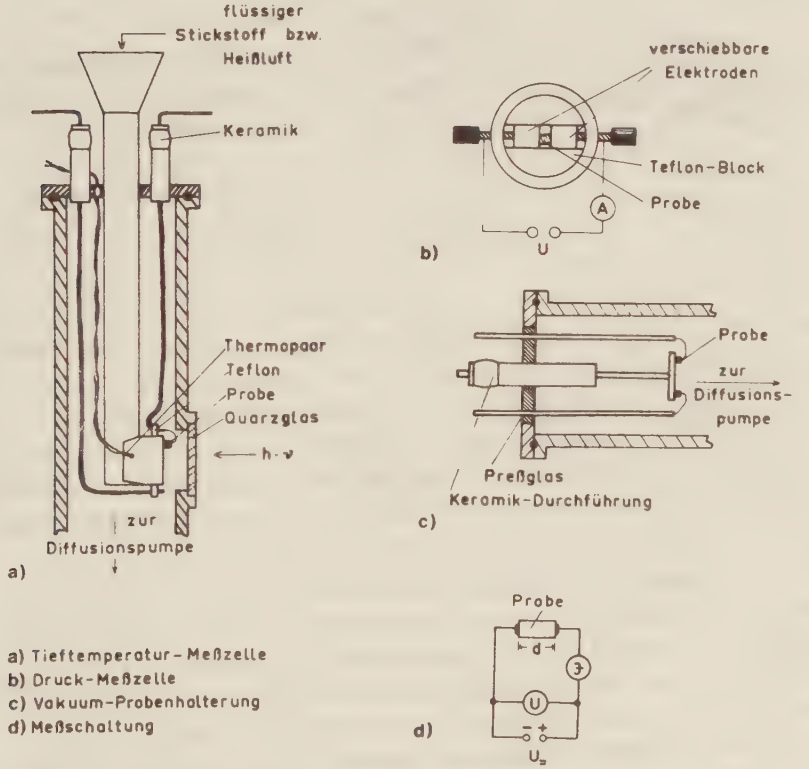
5.5 Messungen der anisotropen Leitfähigkeit

5.5.1 Beschreibung der Meßapparatur und des Meßverfahrens

Aufgrund der Ergebnisse an Pulverproben /2/ waren im günstigten Fall spezifische Leitfähigkeiten von einigen $10^{-13}(\Omega cm)^{-1}$ zu erwarten. Wählt man eine einfache Stromspannungsmeßschaltung nach Fig. 16d, dann ergibt sich für den Ohmschen Bereich:

$$\sigma = \frac{J \cdot d}{U \cdot f} \quad \text{bzw. für den Meßstrom } J_m: \quad J_m = J \cdot \frac{d}{f} = \sigma \cdot U \qquad (25)$$

wenn d der Elektrodenabstand und f die Kontaktfläche ist.



a) Tieftemperatur-Meßzelle
b) Druck-Meßzelle
c) Vakuum-Probenhalterung
d) Meßschaltung

Fig. 16: Meßanordnung zur elektrischen Leitfähigkeit

Die vorhandenen Kristalle waren im ungünstigsten Fall kleine Quader mit einer Länge von ca. 0,8 mm und einem nahezu rechteckigen Querschnitt von ca. 0,7 mm · 0,1 mm Kantenlänge. Zwei Beispiele sind in Fig. 17 dargestellt. Die dabei zu erwartenden Ströme reichten hinunter bis zur Meßgrenze von einigen 10^{-15} A bei 1V Meßspannung (nach Gl. 25). Im anderen Fall lagen plättchenförmige Kristalle vor, mit Flächen bis zu 0,6 mm · 0,6 mm, bei einer Dicke von 0,04 mm, was zu Strömen von 10^{-13} A bei 1V führte.

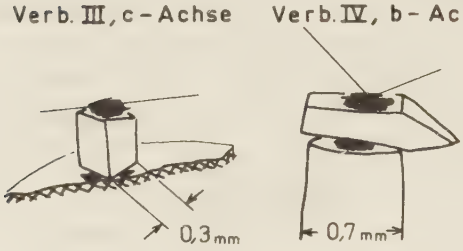


Fig. 17: Beispiel zweier kontaktierter Kristalle (schematisch)

Für die Messungen wurde ein zweistufiger Pumpstand, bestehend aus einer rotierenden Drehschieberpumpe und einer Öl-Diffusionspumpe aufgebaut. Das Endvakuum lag bei $3 \cdot 10^{-6}$ Torr. Die Probenhalterung bestand aus einem Preßglassockel mit Drahtdurchführungen und einem Vakuumflansch. In der Mitte war eine Keramik-Hochspannungsdurchführung (Fa. Leybold) eingebaut, die an ihrem im Vakuum liegenden Ende zu einer kleinen Metallplatte ausgebildet war (Fig. 16c).

Diese Anordnung hatte einen Widerstand von $R \approx 10^{16}$ Ω. Auf der Palette wurden mit einem leitfähigen Bindemittel (Kolloidgraphit-Hydrozol der Fa. Riedel-de-Haen AG) die Kristalle befestigt. Die zweite Elektrode bildete ein 5 µm starker Wolframdraht, der mit dem gleichen Bindemittel befestigt und zu einer der Drahtdurchführungen gezogen wurde. Die Größe der Kontaktflächen sowie deren Abstand wurden mit einem Meßokular

auf maximal ca. 10 % Ungenauigkeit bestimmt.

Die Vier-Punkt-Kompensationsmethode, die einen möglichen Spannungsabfall in den Potential-Kontakten vermeidet, konnte wegen der Kleinheit der Kristalle hier nicht angewendet werden. Dieser Aufwand schien auch ohnehin nicht notwendig, da die Meßergebnisse zwischen den einzelnen Proben recht stark schwankten.

Eine zweite Meßzelle gestattete es, Leitfähigkeiten unter mäßigem Druck von einigen 10 $kpcm^{-2}$ zu messen. Es war ein schraubstockähnliches Gebilde, dessen Backen in Teflonschienen glitten und mittels Schrauben zusammengepreßt werden konnten (Fig. 16b) und gleichzeitig als Elektroden dienten.

Um die Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit nach Gl. 1 messen zu können, sowie zur Trennung der thermisch angeregten Ladungsträger von den optisch angeregten bei der Photoleitfähigkeitsmessung wurde eine Tieftemperaturmeßanordnung konstruiert. Diese bestand aus einem doppelwandigen Metallrohr als Kühlfinger, an dessen unterem Ende die Kristallproben thermisch und elektrisch leitend aufgeklebt wurden (siehe Fig. 16a).

Die zweite Elektrode bestand wieder aus dem 5 µm Wolframdraht, der zu einem Kupferdraht führte, welcher über Keramik-Hochspannungsdurchführungen nach außen gelegt wurde. Ein an den kupfernen Probenträger angeschraubtes Fe-Konstantan-Thermopaar sowie ein zweites mit dem für die Kristalle verwendeten Bindemittel aufgeklebtes Thermopaar erlaubte die genaue Messung der Probentemperatur sowie eines möglichen Temperaturgradienten. Durch Beschicken des Kühlfingers mit flüssigem Stickstoff bzw. Heißluft ließ sich jede Temperatur zwischen ca. 77 K und ca. 500 K erzeugen, je nach thermischer Stabilität der Proben. Diese Meßeinrichtung wurde dann auf den zuvor beschriebenen Pumpstand gesetzt, wobei sich in dem Rezipienten ein Quarzglasfenster zur Bestrahlung der Proben mit Licht der Wellenlänge ca. 280 nm bis 1000 nm befand. Diese Apparatur entstand aus Erkenntnissen, die im Laufe der Messungen zur anisotropen Leitfähigkeit und der Photoleitfähig-

keit entstanden sind. Aus zeitlichen Gründen konnte sie jedoch für die eigentlichen Messungen, die im folgenden Kapitel aufgeführt sind, nicht mehr herangezogen werden.

Für die Strommessung wurde ein Elektrometer (Modell 602, Fa. Keithley) verwendet, das einen Meßbereich bis 10^{-14} A Vollausschlag besaß. Strommessungen in diesem Bereich sind bereits außerordentlich störanfällig, so daß eine gute Abschirmung der Probe und spezielle, innen graphitierte Koaxialkabel notwendig sind. Als Spannungsquelle stand ein Präzionsspannungsgeber der Fa. Knick für den Bereich 0 - 10 V zur Verfügung. Für den Bereich von 10 V bis etwa 60 V wurde ein normales spannungsstabilisiertes Netzgerät verwendet.

Da die Dunkelleitfähigkeit der Proben bereits recht gering waren ($\approx 10^{-13}$ A) und auch keine besonders starke Zunahme der Leitfähigkeit bei Bestrahlung mit sichtbarem Licht zu erwarten war, sollte für die Messung der spektralen Photoleitfähigkeit eine möglichst lichtstarke Quelle zur Verfügung stehen. Dies konnte durch Benutzung einer in der Physikalisch-Technischen-Bundesanstalt (P.T.B. Berlin) vorhandenen Versuchsanordnung verwirklicht werden. Dort wurde eine 2500 W Xenon-Höchstdrucklampe (XBO 2500) benutzt, deren Licht durch einen Doppelmonochromator mit Quarzprismen spektral zerlegt wurde. Durch Verstellen der Monochromatorspalte über ein geeignetes Regelsystem wurde eine wellenlängenunabhängige Bestrahlungsstärke über einen Spektralbereich von ca. 270 nm bis 900 nm erreicht (ausführliches dazu bei Holzapfel und Nink /35/). Da der Wellenlängenbereich bis etwa 310 nm ausgenutzt werden sollte, ergab sich eine Bestrahlungsstärke direkt an der Probe von ca. $4 \mu W cm^{-2}$ (nach Angaben bei /35/). Daraus ergab sich aufgrund der entsprechenden Spaltbreite eine Bandbreite von ca. 1nm bis 4nm in dem hier interessierenden Wellenlängenbereich. Die Änderungen des Photostroms mit der Wellenlänge wurden über das oben genannte Elektrometer von einem x-y-Schreiber kontinuierlich aufgezeichnet.

Die Messungen der Photoemission konnten ebenfalls an einem Meßplatz in der PTB durchgeführt werden. Dabei wurde das Licht

einer Xenon-Höchstdrucklampe mittels eines Prismenmonochromators auf eine feste Anregungswellenlänge (hier 350 nm) eingestellt und auf die Probe geleitet. Das von dieser Probe emittierte langwelligere Licht wurde dann in einem Gitterspektrometer spektral zerlegt und mit einem Photovervielfacher und geeigneter Nachfolgeelektronik angezeigt.

Eine Fehlerbetrachtung der hier verwendeten Geräte konnte unterbleiben, da die Fehler bei der Bestimmung der Kontaktflächen mit Sicherheit um eine Größenordnung (≈ 10 %) höher lagen.

5.5.2 Ergebnisse der Messungen der anisotropen elektrischen Leitfähigkeit

Die Schwierigkeiten, die sich bei diesem Vorhaben ergaben, führten dazu, daß am Ende der Untersuchungen von den in Tab. 1 aufgeführten fünf Verbindungen nur zwei für auswertbare Messungen übrig blieben.

Betrachtet man die an pulverförmigen Proben von Koßmehl, Härtel und Manecke /2/ unter Druck gemessenen Leitfähigkeiten (Tab. 4), so scheiden das Stilben (Struktur von Finder und Mitarb. /26/) und das 2,5-Distyrylthiophen (V) sofort aus, da deren Leitfähigkeit jenseits der Meßgrenze bei ca. $10^{-15}\Omega^{-1}cm^{-1}$ lag. Für das 1,2-Di-2-thienylethylen (I) konnten keine ausreichend großen Einkristalle gezüchtet werden.

Dagegen wurden die Ergebnisse für das 1-Phenyl-2-(2-thienyl)=ethylen mit gewisser Spannung erwartet. Aufgrund der Strukturanalyse sollte die Leitfähigkeit erheblich kleiner als für Verbindung I sein, während Messungen an gepreßten Pulverproben, private Mitteilung /Koßmehl/, einen zehnfach größeren Wert ergaben (siehe Tab. 4). Da in diesem Fall relativ große Kristalle mit Längen bis zu 3mm bei ca. $1mm^2$ Querschnitt zur Verfügung standen, konnte hier in allen drei Achsenrichtungen gut kontaktiert werden.

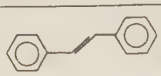
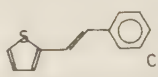
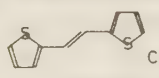
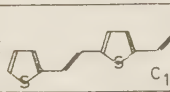
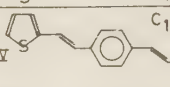
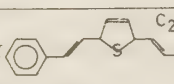
Struktur \ $\sigma\ [\Omega^{-1}cm^{-1}]$	Pulver Proben		Einkristalle		
	1500 kp·cm^{-2}	1 kp·cm^{-2}	a	b	c
 $C_{14}H_{12}$	$\sim 10^{-20}$	$\sim 10^{-20}$	—	—	—
II  $C_{12}H_{10}S$	24×10^{-12}	$\sim 2 \times 10^{-12}$	$< 10^{-15}$		
I  $C_{10}H_8S_2$	$0{,}2 \times 10^{-12}$	$\sim 0{,}02 \times 10^{-12}$	—	—	—
III  $C_{16}H_{12}S_3$	$1{,}4 \times 10^{-12}$	$\sim 0{,}1 \times 10^{-12}$	0,1 - 0,5	2 - 5	1 - 5 $\}10^{-12}$
IV  $C_{18}H_{14}S_2$	$0{,}7 \times 10^{-12}$	$\sim 0{,}1 \times 10^{-12}$	0,1 - 0,5	1 - 6	1 - 7 $\}10^{-12}$
V  $C_{20}H_{16}S$	5×10^{-16}	$\sim 0{,}5 \times 10^{-16}$	—	—	—

Tabelle 4: Elektrische Leitfähigkeitswerte der hier verwendeten Strukturen

Es wurde eine große Anzahl von Kristallen in allen drei kristallographischen Hauptachsen untersucht. Dabei zeigte sich, daß in allen Fällen kein Strom zu messen war, die Leitfähigkeit also kleiner als $10^{-15}\Omega^{-1}cm^{-1}$ (Meßgrenze) sein mußte. Es konnte möglich sein, daß die Oberfläche der Kristalle durch Sauerstoffeinwirkung derart verändert war, daß eine sehr hochohmige Grenzschicht entstand. Daraufhin wurden durch mechanische Bearbeitung frische Oberflächen erzeugt und dann kontaktiert, was aber ebenfalls zu keinem anderen Resultat führte. Wurde ein Einkristall in die Meßzelle nach Fig. 16b gespannt, so konnte mit zunehmendem Zusammenpressen und damit zunehmendem Grad der Pulverisierung des Kristalls nahezu jeder Leitfähigkeitswert zwischen

10^{-15} und $10^{-11}\Omega^{-1}cm^{-1}$ „eingestellt" werden. Gleichzeitig wurde für verschiedene Schritte der Zerkleinerung die Substanz röntgenographisch durch Debye-Scherrer-Aufnahmen untersucht und mit den Einkristall-Röntgenaufnahmen verglichen. Es konnten keine zusätzlichen Linien oder Reflexe beobachtet werden. Somit wurde ausgeschlossen, daß sich die Struktur während des Pulverisierungsvorganges in ihrer chemischen oder mikrokristallinen Struktur wesentlich geändert haben konnte. Eine Erklärung dieses Verhaltens steht aber noch aus.

Die übriggebliebenen Verbindungen III und IV wurden in der in 5.5.1 beschriebenen Weise untersucht. Figur 18 zeigt in doppeltlogarithmischer Auftragung die Strom-Spannungs-Charakteristik für diese beiden Proben, gemessen bei Zimmertemperatur. Da für den gemessenen Strom J_m galt: $J_m = J \cdot \frac{d}{f}$, wurde $J = J_m \cdot \frac{f}{d}$ aufgetragen, d.h. der bezüglich des Geometriefaktors der Kritalle korrigierte Strom. Man erhält dann σ in $\Omega^{-1}cm^{-1}$ direkt durch den Anstieg der Geraden.

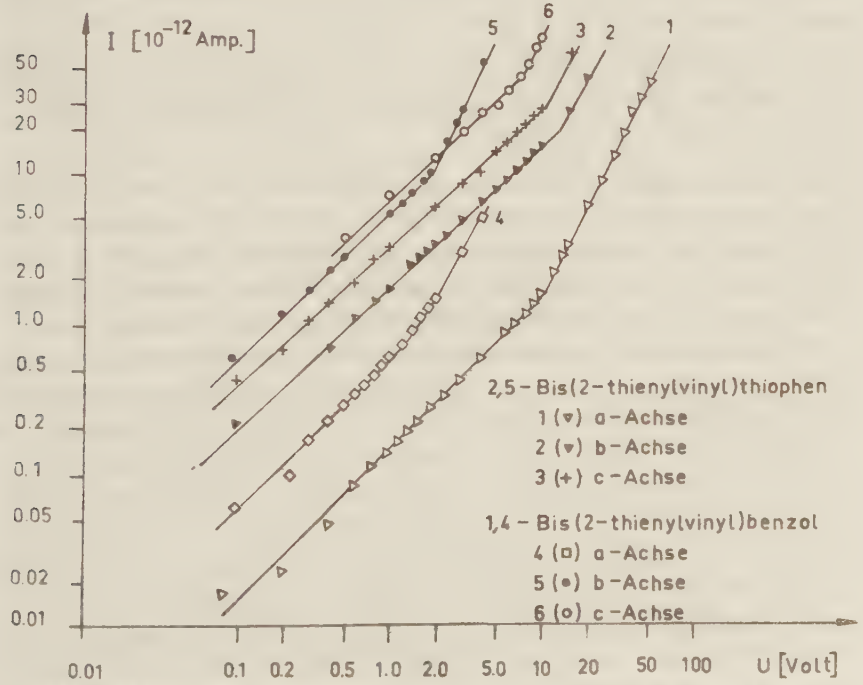


Fig. 18: Strom-Spannungs-Charakteristik für 2 Proben in jeweils drei Achsenrichtungen

Man sieht, daß je nach Probendicke für Spannungen bis ca. 2 bzw. 10 V die Geraden für alle Hauptachsen mit einem Anstieg von 1 verlaufen, d.h. es besteht ein linearer Zusammenhang zwischen Strom und Spannung gemäß dem Ohmschen Gesetz $J = \sigma \cdot U$. Bei höheren Spannungen verlaufen die Geraden recht genau unter einem Anstieg von 2, d.h. dort ist $J \sim U^2$. Das ist das Gebiet, in dem der Strom durch Raumladungseffekte begrenzt wird, nach dem Child-Langmuir-Gesetz /1/.

$$J = 10^{-13} \; f \; D \; \mu \; \frac{U^2}{d^3} \; A \qquad (26)$$

mit : f = Fläche, d = Elektrodenabstand, D = Dielektrizitätskonstante, μ = Beweglichkeit der Ladungsträger

Gleichung (26) gestattet bei Kenntnis von D die Elektronenbeweglichkeit abzuschätzen. Setzt man für D einen Wert der Größenordnung 1 (Styrol: 2,5) ein, dann erhält man für die Verbindungen III und IV grobe Richtwerte von : $\mu \approx 10^{-4} - 10^{-6}$ cm$\cdot$ sec$^{-1}\cdot$Vcm^{-3}.

Die Leitfähigkeitswerte, die sich aus dem linearen Bereich für die verschiedenen kristallographischen Hauptachsen ergeben, sind in Tab. 4 aufgeführt.

Für die Messung in Richtung der einzelnen Achsen mußten für jede Substanz jeweils andere Kristalle verwendet werden. Da die Kristalle möglicherweise neben Verwachsungen (etwa Zwillingsbildung, die mit dem Polarisationsmikroskop ausgesondert werden konnten) weitere Kristallaufbaufehler und Volumen- bzw. Oberflächenverunreinigungen erhielten, war die Streuung der σ-Werte erheblich. Dazu kam noch der recht große Fehler (ca. 10%) der Kontaktflächenbestimmung. Da aber jeweils unterschiedliche physikalische Effekte eine Änderung der Leitfähigkeitswerte bewirken konnten, schien es nicht sinnvoll, hier eine Mittelung vorzunehmen, so daß in Tab. 4 der Variationsbereich für σ angegeben wurde. Trotz all dieser notwendigen Einschränkungen wurde aber ein deutlicher Unterschied von mindestens einer halben, wahrscheinlich aber einer ganzen, Größenordnung der Leitfähigkeitswerte zwischen a- und b- bzw. c-Richtung für beide

Verbindungen III und IV gefunden.

Somit konnte die 5.4 aufgestellte Vermutung über die bevorzugte Richtung des Ladungsträger an zwei Verbindungen bestätigt werden.

5.6 Messung der spektralen Photoleitfähigkeit

Mit der in 5.5.1 angegebenen Meßanordnung wurden für die Verbindung III und IV die spektrale Abhängigkeit des Photostroms gemessen. Fig. 19a zeigt die Ergebnisse jeweils in Richtung der a-Achse und für eine feste Spannung von 1 V, um sicher im Ohmschen Bereich (siehe Fig. 18) zu liegen (Werte für III mal 10). Der Einfluß höherer Spannung auf die Photoleitfähigkeit ist für alle drei kristallographischen Hauptachsen für Verbindung III in Fig. 15b dargestellt. Bei den Kurven für 10 V wurden die Werte mit $\frac{1}{10}$ multipliziert. Da hier die gemessenen Ströme nicht auf gleiche Kristallgröße normiert wurden, war die Leitfähigkeit in a-Richtung etwas höher als in b- bzw. c-Richtung. Obwohl der Unterschied zwischen den Kurven bei dem hier verwendeten Spannungsunterschied von 1 V gegenüber 10 V nicht allzu groß ist, ist festzustellen, daß sich im wesentlichen nur das Doppelmaximum zwischen 450 und 500 nm in seiner Höhe verändert. Ein Einfluß der verschiedenen Achsenrichtungen auf die Lage der Maxima war für III nicht festzustellen, lediglich für die b-Richtung ist das Maximum bei 490 nm um ca. 40 nm nach längeren Wellenlängen hin verschoben.

Diese Abhängigkeit des Photostroms von der Wellenlänge des anregenden Lichtes wurde mit Absorptions- bzw. Emissionsspektren verglichen. Fig. 20 zeigt die von Koßmehl und Mitarb. /2/ in KBr aufgenommenen Kurven der entsprechenden Verbindungen. Durch die relativ starke Verdünnung und das Pressen in KBr bis zur Fließgrenze, kann davon ausgegangen werden, daß keine intermolekularen elektronischen Wechselwirkungen vorhanden sind. Daraufhin wurden an polykristallinen Proben mit relativ großen

Kristalliten die Emissionsspektren nach der in 5.5.1 angegebenen Meßordnung aufgenommen. Fig. 21 zeigt diese Kurven für die in Tab. 1 aufgeführten Verbindungen.

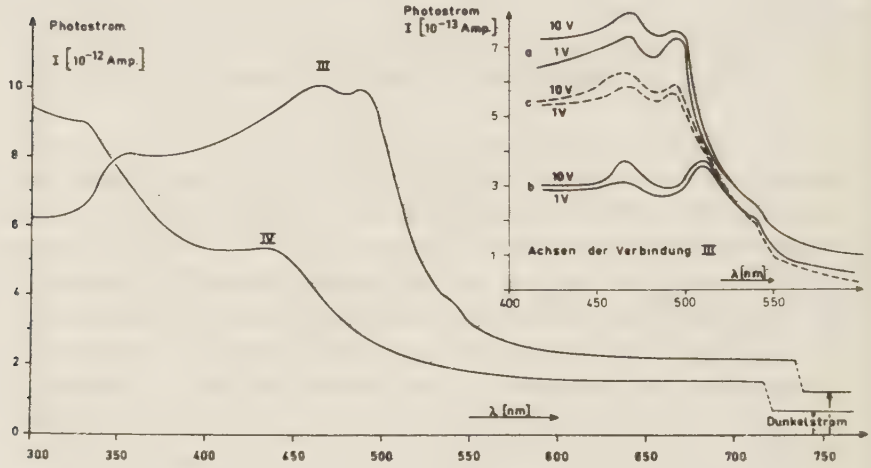


Fig. 19: Photostrom des III: 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophens
IV: 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzols

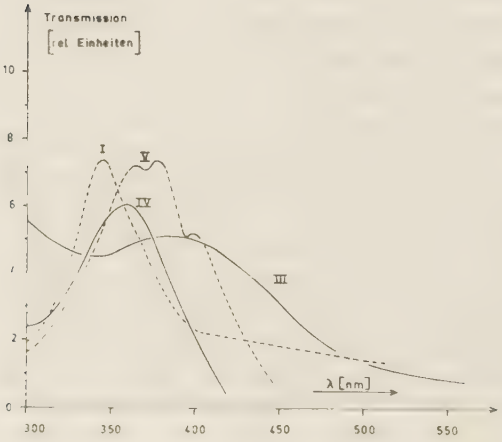


Fig. 20:
Absorptionsspektren
in KBr

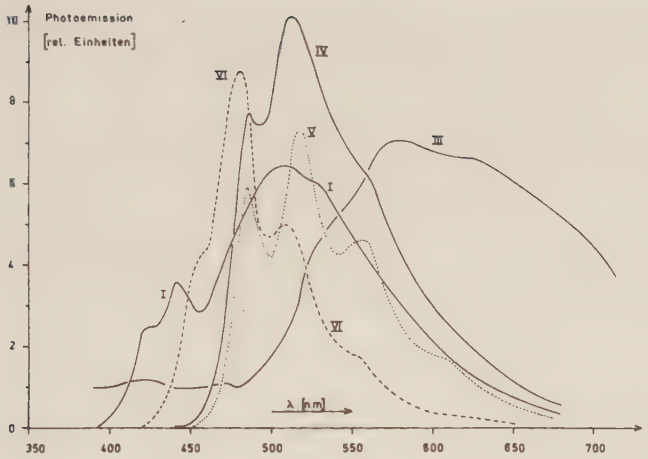


Fig. 21: Fluoreszenzspektren unter UV-Anregung bei 350 nm (Substanznummerierung siehe Tab. 1)

Eine wechselseitige Zuordnung der Maxima der entsprechenden Verbindungen dieser drei sehr verschiedenen Spektren ist zur Zeit leider kaum möglich. Dies erklärt sich aus der Vielfalt der möglichen Elektronenübergänge und der Überlagerung von Effekten am kristallinen Festkörper bedingt durch thermisch bzw. optisch aktivierte Elektronen, besonders bei der Photoleitfähigkeit. Eine Klärung sollte aber bei Anwendung ergänzender Meßmethoden (z.B. mit Hilfe der in 5.5.1 beschriebenen Tieftemperatur-Meßanordnung) möglich sein.

Betrachtet man das Molekül von III (Fig. 6), so entspricht der Teil mit den Atomen S(2) bzw. S(3) der Verbindung I (Fig. 3). Dagegen ist die Doppelbindung zwischen den Thiophenringen mit S(1) und S(2) mit 1,30 Å um 0,3 Å kürzer als die andere zwischen C(11) und C(12) mit 1,33 Å. Es wäre denkbar, daß dieser Teil des Moleküls leichter anregbar ist, so daß das Absorptionsmaximum von I (Fig. 20) dem Maximum des Photostroms von III

an der Stelle zugeordnet werden kann. All das wäre in gutem Einklang mit der bei 5.4 gemachten Aussage des möglichen Elektronenübergangs von S(2) nach S(3), dann S(3) nach S(2), usw. (siehe Fig. 12).

Für Verbindung IV entspricht die Lage des Absorptionsmaximums etwa dem Maximum des Photostroms. Die Emissionsspektren am Festkörper sind dagegen erwartungsgemäß nach der Stokes'schen Regel gegenüber den Absorptionsspektren zu längeren Wellenlängen hin verschoben. Eine Zuordnung dieser Maxima zu denen des Photostroms ist gegenwärtig nicht zu treffen.

6. Vergleich der röntgenographischen Daten mit HMO-Berechnung

Für eine große Anzahl Verbindungen der hier interessierenden Klassen wurden von Koßmehl, Bohn und Broser /36,37/ HMO-Rechnungen durchgeführt. Die sich daraus ergebenden Bindungsordnungen $P_{\mu\nu}$ sind ein Maß für die Bindungslänge. Dabei steht eine Bindungsordnung von 0,000 für eine C-C-Einfachbindung wie im Ethan und eine solche von 1,000 für eine isolierte C=C-Doppelbindung.

Die HMO-Rechnung geht von einer möglichen Eigensymmetrie der Moleküle aus, d.h. z.B. bei III: Spiegelebenen durch S(2) senkrecht auf der Molekülebene stehend und Thiophenring mit S(1) einschließlich C(5) um die Gerade durch C(6) - C(7) um 180° gedreht. Deshalb werden für beide Molekülhälften die selben Werte errechnet. Entsprechendes gilt natürlich auch für alle anderen Moleküle. Die Röntgenstrukturanalyse findet dagegen für die Verbindungen III, IV und V azentrische Moleküle und damit unterschiedliche Daten für die zugeordneten Molekülhälften. Dieser Sachverhalt ist in Fig. 22 durch die offenen bzw. ausgefüllten Symbole dargestellt. Dort sind die röntgenographisch ermittelten C-C-Bindungslängen R_{exp} gegen die Bindungsordnungen $P_{\mu\nu}$ aufgetragen.

Berücksichtigt man die Fehler der einzelnen Meßwerte R_{exp}, durch ein Fehlerintervall angedeutet, so läßt sich in guter Näherung eine Ausgleichsgerade angeben. Das bedeutet, daß die Bindungsordnungen mit den Bindungslängen linear korreliert sind. Das gleiche Resultat wurde auch für Verbindung I erhalten /38/. Zusätzlich ist festzustellen, daß trotz der relativ großen Streuung der Werte für die drei hier aufgeführten Verbindungen die gleiche Korrelationsgerade erhalten wird.

Bedenkt man, daß die HMO-Rechnung vom freien Molekül ausgeht, während das Molekül im Kristallverband verschiedensten Kristallkräften ausgesetzt ist, dann ist die relativ gute Korrelation beachtlich. Ein Beispiel dafür ist die Struktur III, bei der neben der unerwarteten Asymmetrie der Thiophenlagen auch die eine zentrale Doppelbindung mit 1,300 Å wesentlich

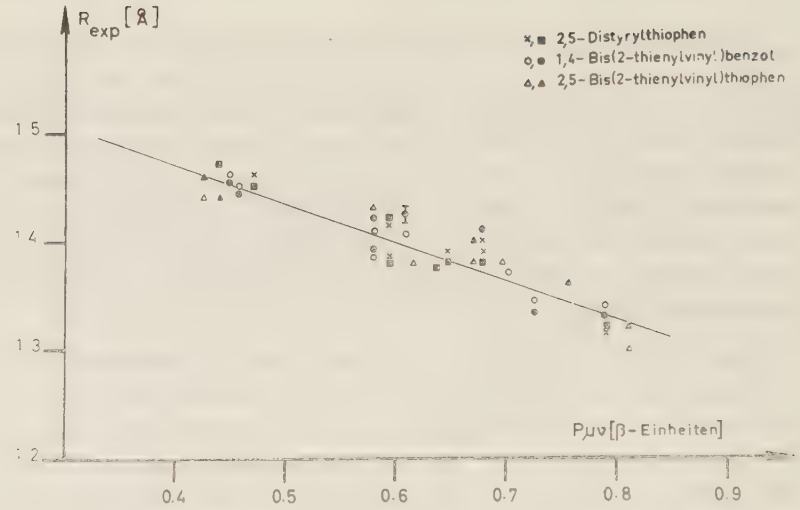


Fig. 22: Korrelation zwischen den röntgenographisch bestimmten Bindungslängen R_{exp} und den berechneten Bindungsordnungen Pμν der C-C-Bindungen

kürzer als erwartet ausfiel. Dementsprechend liegt der dazugehörige R_{exp}-Wert recht weit von der Ausgleichsgeraden entfernt.

An dieser Stelle sei noch eine Bemerkung gemacht über die Bewichtungsschemata für die gemessenen Intensitäten der Strukturen III bis V. Die üblichen mathematischen Methoden der Kleinste-Quadrate-Verfeinerung können nur die statistischen Fehler liefern. Um wenigstens einen gewissen Anteil systematischer Fehler berücksichtigen zu können, wurden die bei den einzelnen Strukturbeschreibungen angegebenen Datenanalysen bzw. Bewichtungsschemata eingeführt. Da der sich dann ergebende R-Wert schlechter ist als vorher und auch die Standardabweichungen nicht signifikant besser werden, bleibt die Frage, inwieweit dieser Aufwand sinnvoll war. Geht man aber aus von der linearen Korrelation zwischen Bindungslängen und Bindungsordnungen, und das ist durchaus berechtigt, dann war für diese drei Substanzen die Summe der Abstände der Meßwerte (in Fig. 22) von der Ausgleichsgeraden nach der Bewichtung kleiner als vorher, d.h. die Punkte lagen etwas besser auf der Korrelationsgeraden (gezeichneter Fall).

7. Diskussion

Die aus der Röntgenstrukturanalyse gewonnenen Erkenntnisse über die Molekülgeometrie und -anordnung im Festkörper ließen Aussagen über den möglichen Ladungsträgertransport zu. Die z.T. durch die Messung der anisotropen elektrischen Leitfähigkeit bestätigten Annahmen lassen nun zusammen mit Leitfähigkeitsmessungen an weiteren pulverförmigen Proben von Härtel, Koßmehl, Manecke und Mitarb. /2/ Schlußfolgerungen über das Zustandekommen einer möglichst hohen (makroskopisch meßbaren) Leitfähigkeit zu.

Danach scheinen im wesentlichen drei Kriterien maßgeblich zu sein in Übereinstimmung mit der in 2.4 vorgeschlagenen Modellvorstellung:

1. genügende Anzahl von Elektronenlieferanten pro Molekül (hier Schwefelatome),
2. kurze intermolekulare Abstände (hier S-S-Orbitalüberlappung)
3. gute Delokalisierung der π-Elektronen

Bei den in dieser Arbeit vorgelegten Strukturbeispielen sind die Kriterien 1. und 2. nicht ohne weiteres trennbar, da beim Übergang von einem S-Atom pro Molekül (Verbindung V) zu zwei S-Atomen (Verbindung IV) auch der intermolekulare Abstand beträchtlich abnahm. Bei weiterem Übergang zu drei S-Atomen pro Molekül (Verbindung III) nahm er dagegen wieder zu.

	$\frac{\pi\text{-El}}{V}$ $e\text{Å}^{-3}$	zentrale Doppelbindung(en) (gerundet) [Å]	kürzester intermol. S-S-Abstand [Å]	$\sigma[\Omega^{-1}cm^{-1}]$ x 10^{-13}
I	0,077	1,31	3,80	2,2
II	0,063	1,20	4,10	240
III	0,078	1,30 1,33	3,90	14
IV	0,071	1,34 1,33	3,60	7
V	0,063	1,32 1,32	5,74	0,005
T4T	0,073	1,34 1,34	3,75	15
T6T	0,071	1,34 1,33 1,33	3,81	7,7

Tab. 5: Vergleich von strukturanalytischen Daten und Leitfähigkeitswerten

So ist Punkt 1 durch Verbindung I und III gut belegt, bei denen sich die intermolekularen S-S-Abstände nur um 0,1 Å unterscheiden, die Leitfähigkeit aber um fast den Faktor 7 zu Gunsten der letzteren. In Tab. 5 sind die hier interessierenden Daten zusammengestellt.

$\frac{\pi\text{-El}}{V}$ bezeichnet dabei die Anzahl der nicht für normale Einfachbindungen benötigten Elektronen dividiert durch das Elementarzellenvolumen (nach Koßmehl, private Mitteilung). Diese Größe gibt also die Anzahl der Elektronen an, die im Grundzustand des Moleküls je nach Durchkonjugation mehr oder weniger gut als quasi frei anzusehen sind. Dabei ist T4T des 1,4-Di(2-thienyl)-1,3-Butadien und T6T das 1,6-Di(2-thienyl)-1,3,5-Hexatrien, das von Bohn /36/ synthetisiert und auf Leitfähigkeit untersucht wurde, Kristallstruktur von Buschmann /34/. Die Leitfähigkeitswerte sind die von Koßmehl und Mitarb. /2/ unter Standardbedingungen gemessenen.

Vergleicht man die Reihe I, T4T, T6T, wobei T für Thiophenring steht, also I = T-CH=CH-T

T4T = T-CH=CH-CH=CH-T

T6T = T-CH=CH-CH=CH-CH=CH-T bedeutet (siehe /36/), so sieht man, daß die Leitfähigkeit über ein deutliches Maximum bei T4T geht.

Geht man von der Tatsache aus, daß die gemessene elektrische Leitfähigkeit eindeutig von dem Molekülbau und der Festkörperordnung abhängt, läßt sich etwa folgendes sagen: Beim Übergang von I nach T4T nimmt der Grad der Konjugation erheblich zu, bei gleichzeitiger geringfügiger Abnahme des intermolekularen S-S-Abstandes. Das bedeutet eine Erniedrigung der Energiedifferenz E_3-E_2 in 2.4, so daß weitere Elektronen in den freien Zustand E_3 gelangen können. Die Abnahme von σ bei T6T kann dann durch die Zunahme des S-S-Abstandes bei gleichzeitiger Abnahme der quasi-freien Elektronen pro $Å^3$ gedeutet werden.

Sehr gut ist der hier extrem geringe σ-Wert der Verbindung V durch das Modell des periodischen Potentials (2.4) zu erklären, da V sehr große S-S-Abstände bei zusätzlich geringerer π-Elektronenzahl besitzt.

Eine Besonderheit stellt Struktur III dar, bei der der S-S-Abstand fast 0,2 Å größer als der doppelte Van der Waals-Radius und die Konjugation an einer Stelle des Moleküls schlecht ist, die Leitfähigkeit aber um mehr als den Faktor 6 größer als bei I ist. Das erklärt sich daraus, daß die Transportwege der Elektronen (wie bereits in 5.4 erwähnt) möglicherweise bevorzugt über den Molekülteil verlaufen, der die bereits gut konjugierte zentrale Doppelbindung besitzt, was durch die Anisotropie der Leitfähigkeit erhärtet wurde. Zusätzlich wirkt aber der restliche Thiophenring mit S(1) (siehe Fig. 12) offensichtlich als Elektronendonator, da die Leitfähigkeit auch besser als die der gut konjugierten Struktur IV ist.

Weitergehende Aussagen über Korrelation von Kristallstrukturdaten und Leitfähigkeitseigenschaften aufzustellen schien hier wegen der vergleichsweise groben Messung der letzteren an Pulverproben nicht sinnvoll.

Ganz aus diesem Rahmen fällt die Verbindung II, deren Leitfähigkeitswert aufgrund der kristallographischen Daten zusammen mit der hier gewonnenen Modellvorstellung irgendwie zwischen I und V zu erwarten wäre. Dies konnte auch für den Einkristall nachgewiesen werden, da die Leitfähigkeit für alle drei Achsenrichtungen unterhalb der Meßgrenze von einigen $10^{-15}\Omega^{-1}cm^{-1}$ liegen mußte. Der hier sehr hohe σ-Wert für Pulverproben (Tab.5) macht die Annahme weiterer leitfähigkeitssteigender Effekte notwendig. Im wesentlichen sind folgende Effekte zu diskutieren:

1. chemische Verunreinigungen (z.B. Einbau von Fremdatomen)
2. Störungen der Festkörperordnung (z.B. Versetzungen, Zwillingsbildungen)
3. Oberflächeneffekt (Sauerstoffbelegung, Substanzveränderung durch Lufteinwirkung)

Da hier kein Atomgitter vorliegt, müßten z.B.Fremdatome in wesentlich höherem Prozentsatz als bei den anorganischen Halbleitern eingebaut werden, um diesen Unterschied von mehr als drei Zehnerpotenzen für σ zu erklären. Das konnte aber durch sorgfältige Analysen ausgeschlossen werden. Störungen der Festkörperordnung sind zwar aufgrund der Ergebnisse der Strukturanalyse

möglich, z.B. in Form statistisch verteilter Fehlordnungen. Solche Modelle mit kürzeren S-S-Abständen ließen sich jedoch nicht mit den kristallographischen Daten in Einklang bringen. Oberflächeneigenschaften scheinen dagegen in der Tat eine große Rolle bei dieser Verbindung zu spielen.

Durch eine Veränderung der Oberflächen können die Energiebänder dort sehr stark nach oben gebogen werden, was für die Elektronen in oberflächennahen Schichten ein Absenken der zu überwindenden Potentialbarrieren bedeutet. Dieser Oberflächenbereich würde natürlich durch zunehmenden Grad der Zerkleinerung des Kristalls ebenfalls stark zunehmen, was die Steigerung der Leitfähigkeit bei dem entsprechenden Experiment (siehe 5.5.2) bzw. die großen Werte für Pulverproben erklärt.

Zum Schluß ist noch die Bemerkung über die intermolekulare Wechselwirkung zu machen. Diese führt zu dem stark asymmetrischen Molekül von III bzw. zu dem Herausdrehen der Thiophenringe aus der Molekülbene für IV. Die Einwirkung dieser Kristallkräfte auf die Moleküle ist aber offensichtlich nicht so groß, um die Bindungslängen der recht stabilen Thiophen- bzw. Benzolringe wesentlich zu beeinflussen. Dies ist durch die HMO-Rechnung (siehe Fig. 22) gut bestätigt worden.

8. Ausblick

Diese Arbeit hat gezeigt, daß eine Verknüpfung von Kristallstrukturergebnissen mit Meßdaten festkörperphysikalischer Untersuchungsmethoden bereits zu einer recht gut interpretierbaren Modellvorstellung über Ladungsträgertransportphänomene führt. Um jedoch ein theoretisches Modell, etwa nach der Art des periodischen Potentials von Kronig und Penney (siehe 2.3) genauer zu verifizieren, bedarf es noch erheblich weiterführender Arbeiten. So ist z.B. die in 5.6 angesprochene Trennung der thermisch angeregten von den optisch angeregten Elektronen mit der bereits aufgebauten Apparatur (siehe 5.5.1) zu untersuchen. Dies soll dann zusammen mit weiteren Photoemissions-bzw. Photostromspektren eine bessere wechselseitige Zuordnung derselben ermöglichen bzw. Aussagen über mögliche Energiebandabstände und Lagen von eventuell vorhandenen Donatorniveaus (z.B. bei Struktur III) zulassen.

Mit Hilfe von Abklingmessungen der Leitfähigkeit bei Spannungsimpulsen könnte die Beweglichkeit der Elektronen ermittelt werden, die zusammen mit der Leitfähigkeit die Zahl der quasi-frei beweglichen Ladungsträger ergibt. Die für die Substanzen I, T4T und T6T gemachten Aussagen in 7. sind durch Messungen der anisotropen Leitfähigkeit zu belegen.

Weitere Homologe aus der Reihe der Poly-(thienylen-(2,5)-ethylen)-Oligomere sind kristallographisch und festkörperphysikalisch zu untersuchen, um diese mögliche Systematik des Ladungsträgertransports zu erhärten. Zusätzlich ist das theoretische Modell des modifizierten periodischen Potentials mathematisch ausführlich zu behandeln.

Die nach diesem Modell nicht verständliche extrem hohe Leitfähigkeit der 1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen-Pulverproben wäre genauer, als es hier geschehen konnte, zu untersuchen. Dazu müßte versucht werden, z.B. durch Sublimation in verschiedenen Schutzgasatmosphären, geeignete Kristalle dieser Substanz zu erhalten. Bei größeren Kristallen könnten mit der Vierpunkt-Methode Leitfähigkeiten an der Oberfläche bzw. in oberflächennahen Schichten gemessen werden.

9. Zusammenfassung

Mit Hilfe von röntgenographischen Untersuchungen an Einkristallen konnten die Strukturen von vier Verbindungen aus der Reihe der Thiophenring-enthaltenden Polyen- bzw. Polyheteroarylenen geklärt werden. Diese konnten bis zu R-Werten zwischen 4,3 % und 7,7 % verfeinert werden. Für eine weitere Verbindung konnte ein Strukturmodell gefunden werden, das sich aber kristallographisch und chemisch nicht befriedigend verfeinern ließ.

An einigen dieser Verbindungen konnten anisotrope elektrische Leitfähigkeiten sowie spektrale Photoleitfähigkeit und Photoemissionsspektren gemessen werden. Während zur genauen wechselseitigen Zuordnung der Spektren noch weitere Messungen notwendig sind, waren die anisotropen Leitfähigkeitswerte z.T. in guter Übereinstimmung mit Messungen an Pulverproben und bestätigten das Modell des periodischen Potentials, das zur Beschreibung des Ladungstransports durch den Kristall vorgeschlagen wurde.

So konnte gezeigt werden, daß und in welcher Weise neben der chemischen Struktur dieser koplanaren π-Elektronensysteme auch Packungsdichten in der Elementarzelle, die Lage der Moleküle zueinander und die Kristallinität eine bedeutende Rolle für den Ladungsträgertransport und somit für die elektrische Leitfähigkeit spielen.

Die röntgenstrukturanalytisch ermittelten C-C-Bindungslängen wurden den aus der HMO-Theorie errechneten Bindungsordnungen gegenüberstellt. Dabei ergab sich nicht nur eine gute lineare Korrelation dieser Daten für die einzelnen Strukturen, sondern es wurde für alle hier gelösten Strukturen in guter Näherung die gleiche Korrelationsgerade erhalten.

Die Kristallstrukturanalyse, die heute Dank der großen und schnellen Rechner, sowie eines umfangreichen Programmsystems einen beachtlichen Grad an Perfektion erreicht, ist somit ein ausgezeichnetes Handwerkzeug, um neben der Lösung der Strukturen mögliche Modelle für den Ladungsträgertransport durch den kristallinen Festkörper zu finden und zu verstehen.

Orts- und Temperaturparameter des 1,2-Di-2-thienylethylens. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung. (Die Temperaturfaktoren · 100 $Å^2$)

Atom	x	y	z	u	u_{11}	u_{22}	u_{33}	u_{12}	u_{13}	u_{23}
S (1)	0,3578 (1)	0,6338 (2)	0,3861 (2)		6,23(9)	6,22(9)	4,9(1)	0,27(6)	-0,53(6)	-0,81(6)
C (1)	0,1994 (5)	0,6245 (8)	0,4436 (9)		6,4 (3)	6,0 (3)	5,4(3)	1,1 (3)	0,9 (2)	0,4 (2)
C (2)	0,3375 (5)	0,5172 (6)	0,1398 (8)		6,2 (3)	4,3 (3)	4,4(3)	0,7 (2)	0,2 (2)	0,3 (2)
C (3)	0,2094 (4)	0,471 (1)	0,096 (1)		5,4 (4)	3,8 (4)	4,2(4)	-0,1 (3)	-1,3 (3)	-0,5 (3)
C (4)	0,1326 (6)	0,5344 (8)	0,280 (1)		4,9 (3)	6,5 (4)	7,2(4)	0,1 (3)	-0,7 (3)	1,0 (3)
C (5)	0,4401 (5)	0,4749 (7)	-0,0130 (9)		7,1 (3)	4,8 (3)	4,9(3)	0,2 (3)	-1,0 (3)	-0,3 (2)
C'(5)	0,5599 (5)	0,5251 (7)	0,0130 (9)		7,1 (3)	4,8 (3)	4,9(3)	0,2 (3)	-1,0 (3)	-0,3 (2)
H (1)	0,179 (5)	0,691 (7)	0,577 (9)	7,1(2,0)						
H (3)	0,174 (-)	0,400 (-)	0,046 (-)	4,6(2,0)						
H (4)	0,060 (6)	0,527 (9)	0,26 (1)	8,6(2,0)						
H (5)	0,417 (5)	0,393 (8)	-0,12 (1)	7,6(2,0)						

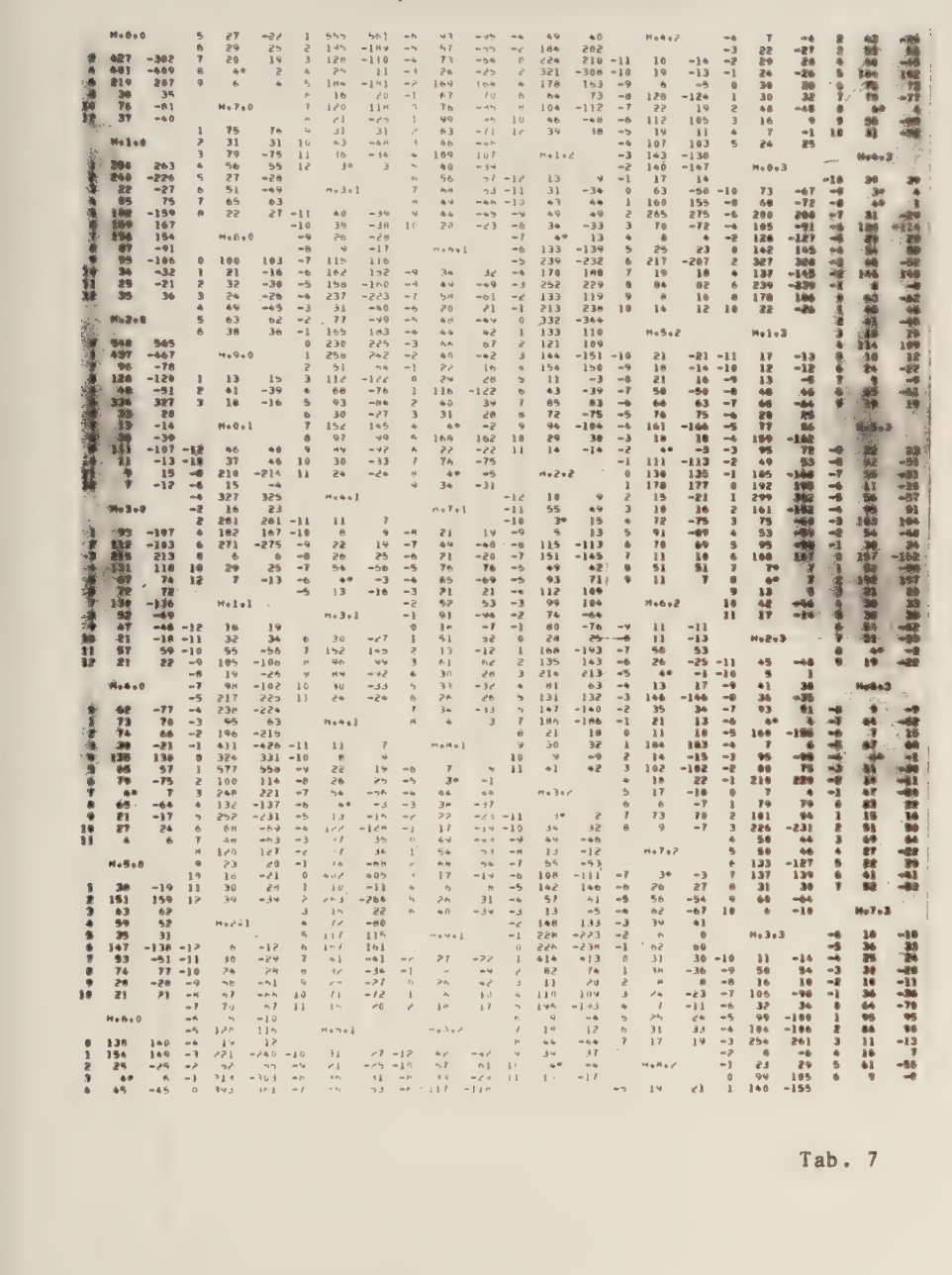
Tab. 5

Bindungslängen und -winkel des 1,2-Di-2-thienylethylens. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung.

Bindungslängen in Å		Bindungswinkel	
S(1) - C(1)	1,701 (6)	S(1) - C(1) - C(2)	93,2° (3)
S(1) - C(2)	1,701 (5)	C(1) - S(1) - C(4)	111,0° (4)
C(3) - C(2)	1,40 (1)	C(4) - C(1) - C(3)	114,4° (5)
C(3) - C(4)	1,44 (1)	C(3) - C(2) - C(4)	110,5° (7)
C(4) - C(1)	1,351 (8)	C(2) - S(1) - C(3)	111,3° (5)
C(5) - C(2)	1,457 (7)	C(2) - C(3) - C(5)	124,2° (4)
C(5) -C'(5)	1,309 (8)	C(2) - S(1) - C(5)	124,4° (6)
C(1) - H(1)	0,96 (6)	C(5) - C(2) -C'(5)	125,8° (5)
C(3) - H(3)	1,08 (-)		
C(4) - H(4)	0,80 (6)		
C(5) - H(5)	0,90 (6)		

Tab. 6

LIST /FO/ /FC/ OF 1,2-DI-2-THIENYLETHYLEN



Tab. 7

LIST /FO/ /FC/ OF 1,2-DI-2-THIENYLETHYLEN

Tab. 7

Orts- und Temperaturparameter des 1-Phenyl-2-(2-thienyl)ethylen. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung. (Die Temperaturf. x 100 $Å^2$).

Atom		x	y	z	U_{11} oder U	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
S	1	.6725(6)	.8056(5)	.3759(8)	11.2(5)	7.3(3)	7.9(4)	-1.6(3)	.5(4)	-.7(2)
C	1	.8462(8)	.7941(8)	.413 (1)	8.4(4)	13.0(7)	11.1(7)	2.7(5)	2.5(4)	4.3(5)
C	2	.8803(8)	.8751(9)	.495 (1)	9.8(6)	14.1(8)	11.0(7)	-1.9(6)	-.2(5)	3.6(6)
C	3	.804 (2)	.953 (2)	.547 (3)	13.9(17)	14.2(12)	7.3(8)	-7.4(10)	-2.9(8)	2.4(7)
C	4	.6576(7)	.9306(4)	.4856(7)	13.3(5)	6.0(3)	5.7(4)	-1.3(3)	1.1(3)	.4(2)
C	5	.5500(6)	1.0080(5)	.5275(8)	15.9(8)	8.1(3)	6.2(5)	-4.3(5)	-.0(4)	.5(3)
C	8	.630 (2)	.834 (2)	.396 (4)	7.7(12)	14.9(20)	11.6(14)	.9(9)	2.0(8)	2.6(13)
C	9	.749 (2)	.7718(9)	.363 (2)	21.4(16)	7.8(7)	9.0(7)	3.7(10)	6.0(11)	.4(5)
C	12	.761 (3)	.958 (2)	.533 (4)	12.7(22)	5.8(7)	7.0(9)	-2.4(8)	-3.1(11)	-.3(6)

Tab. 8

LISTE 0/ F/C/ (*100) OF 1-PHENYL-2-(2-THIENYL)ETHYLEN

Tab. 9

0,K,0

2	52	43
3	5*	0
4	388	376
5	34	0
6	88	101
7	4*	0
8	229	204
9	12	0
10	90	81
11	5*	0
12	35	37
13	4*	0
14	27	21

1,K,0

0	3*	0
1	3*	0
2	5	0
3	3*	0
4	4*	0
5	4*	0
6	4*	0
7	4*	0
8	4*	0
9	4*	0
10	5*	0
11	5*	0
12	5*	0
13	4*	0
14	4*	0

2,K,0

0	839	883
1	29	50
2	319	310
3	78	70
4	180	162
5	27	6
6	134	149
7	137	133
8	187	180
9	130	136
10	5*	14
11	28	26
12	55	57
13	4*	0
14	11	6

3,K,0

0	6*	0
1	4*	0
2	4*	0
3	4*	0
4	10	0
5	8	0
6	4*	0
7	4*	0
8	4*	0
9	7	0
10	5*	0
11	5*	0
12	5*	0
13	4*	0
14	4*	0

4,K,0

0	395	412
1	192	159
2	223	226
3	19	34
4	294	290
5	73	80
6	45	38
7	36	48
8	85	103
9	86	88
10	47	42
11	23	21
12	16	17
13	12	8
14	16	16

5,K,0

0	36	0
1	4*	0
2	4*	0
3	4*	0
4	4*	0
5	26	0
6	4*	0
7	4*	0
8	4*	0
9	5*	0
10	5*	0
11	5*	0
12	4*	0
13	4*	0

6,K,0

0	265	258
1	65	59
2	157	152
3	71	77
4	52	23
5	76	81
6	20	22
7	66	83
8	155	148
9	33	35
10	51	46
11	18	20
12	18	9
13	6	6

7,K,0

0	5*	0
1	4*	0
2	4*	0
3	4*	0
4	4*	0
5	4*	0
6	4*	0
7	7	0
8	5*	0
9	5*	0
10	4*	0
11	4*	0
12	4*	0

8,K,0

0	5	6
1	30	27
2	8	3
3	51	51
4	72	68
5	5*	13
6	11	8
7	43	38
8	25	26
9	17	18
10	32	29
11	10	11

9,K,0

0	8	0
1	5*	0
2	5*	0
3	5*	0
4	5*	0
5	5*	0
6	5*	0
7	4*	0
8	4*	0
9	4*	0
10	4*	0

10,K,0

0	55	50
1	21	28
2	17	15
3	21	11
4	5*	12
5	17	5
6	10	10
7	13	17
8	20	12
9	14	10

11,K,0

0	4*	0
1	7	0
2	4*	0
3	4*	0
4	4*	0
5	4*	0
6	4*	0
7	4*	0
8	4*	0

12,K,0

0	4*	6
1	4*	9
2	14	14
3	4*	16
4	16	14
5	4*	1
6	4*	7

13,K,0

0	4*	0
1	4*	0
2	4*	0

0,K,-1

1	4	0
2	477E	0
3	5	0
4	487	505
5	7	0
6	232	227
7	8	0
8	95	101
9	10	0
10	9	6
11	11	0
12	17	23
13	10	0
14	13	13

1,K,-1

0	4	0
1	302	263
2	1091E	0
3	293	267
4	9	14
5	208	200
6	393	395
7	4*	17
8	53	46
9	10	5
10	12	10
11	59	58
12	7	8
13	21	16
14	24	31

2,K,-1

0	5	0
1	136	130
2	100	118
3	178	164
4	247	248
5	89	74
6	98	98
7	50	47
8	89	94
9	40	42
10	9	5
11	30	33
12	5*	1
13	23	24
14	7	6

3,K,-1

0	5	0
1	135	130
2	147	137
3	203	173
4	129	123
5	20	10
6	194	179
7	101	108
8	8	18
9	56	68
10	48	52
11	51	48
12	13	4
13	4*	2
14	11	6

4,K,-1

0	6	0
1	131	115
2	144	138
3	52	58
4	89	90
5	88	93
6	38	46
7	33	34
8	30	29
9	12	12
10	29	31
11	27	27
12	20	20
13	20	19
14	13	13

5,K,-1

0	7	0
1	21	6
2	320	315
3	160	157
4	93	92
5	20	13
6	58	76
7	8	6
8	51	47
9	23	31

LIST F/O/ F/C/ (*100) OF 1-PHENYL-2-(2-THIENYL)ETHYLEN

Tab. 9

5,K,-1

10	52	57
11	20	24
12	16	10
13	12	8

6,K,-1

0	8	0
1	4*	2
2	93	88
3	4*	2
4	104	97
5	12	17
6	77	74
7	25	28
8	13	12
9	5*	10
10	12	12
11	9	9
12	26	25
13	7	5

7,K,-1

0	9	0
1	25	37
2	43	17
3	27	29
4	28	34
5	17	14
6	83	72
7	33	23
8	62	60
9	63	61
10	42	43
11	20	15
12	4*	6

8,K,-1

0	10	0
1	13	5
2	5*	2
3	27	27
4	15	15
5	9	6
6	24	21
7	5*	0
8	16	15
9	13	13
10	4*	3
11	16	14

9,K,-1

0	11	0
1	54	59
2	49	35
3	5*	2
4	15	21
5	5*	12
6	5*	12
7	4*	9
8	4*	2
9	4*	1
10	10	8

10,K,-1

0	11	0
1	5*	2
2	17	15
3	9	11
4	18	13
5	4*	11
6	14	11
7	7	10
8	4*	1
9	4*	1

11,K,-1

0	10	0
1	8	2
2	4*	5
3	10	14
4	13	8
5	4*	9
6	21	23
7	4*	9
8	14	10

12,K,-1

1	4*	2
2	4*	3
3	4*	5
4	7	7
5	4*	7

13,K,-1

1	4*	3

0,K,-2

01410E		0
1	5	0
2	684E	0
3	6	0
4	101	61
5	7	0
6	22	10
7	9	0
8	66	50
9	10	0
10	19	9
11	11	0
12	8	2
13	10	0
14	23	23

1,K,-2

0	681	689
1	165	149
2	841E	0
3	117E	0
4	78	94
5	8	13
6	104E	0
7	89	86
8	118	113
9	44	38
10	93	92
11	5*	12
12	24	20
13	7	8
14	10	10

2,K,-2

0	267E	0
1	188	192
2	129E	0
3	26	19
4	62	45
5	99	90
6	115	104
7	30	2
8	112	108
9	51	44
10	44	50
11	45	45
12	25	28
13	9	8
14	9	7

3,K,-2

0	34	31
1	192	205
2	96	114
3	30	33
4	99	100
5	39	38
6	62	64
7	104	112
8	40	50
9	80	88
10	37	30
11	12	11
12	4*	4
13	4*	2
14	11	13

4,K,-2

0	223	209
1	48	18
2	117	105
3	45	46
4	179	163
5	35	29
6	51	60
7	34	27
8	20	21
9	23	15
10	14	9
11	8	10
12	14	13
13	4*	5

5,K,-2

0	332	327
1	93	80
2	83	95
3	17	10
4	14	31
5	26	34
6	114	115
7	48	54
8	79	84
9	27	27
10	52	49
11	23	24
12	12	13
13	7	6

6,K,-2

0	96	72
1	34	36
2	39	17
3	23	26
4	40	28
5	88	98
6	73	70
7	46	54
8	66	60
9	20	22
10	11	3
11	4*	7
12	4*	4

7,K,-2

0	90	80
1	4*	2
2	66	75
3	14	22
4	34	30
5	34	42
6	19	17
7	13	14
8	50	44
9	11	14
10	40	39
11	4*	8
12	18	18

8,K,-2

0	21	24
1	7	7
2	22	24
3	38	37
4	44	40
5	25	15
6	8	6
7	7	0
8	7	6
9	8	4
10	11	8
11	13	16

9,K,-2

0	33	31
1	14	12
2	9	10
3	4*	1
4	12	12
5	18	16
6	14	8
7	16	19
8	12	6
9	22	22
10	4*	7

10,K,-2

0	21	22
1	18	15
2	4*	3
3	16	15
4	4*	9
5	4*	0
6	4*	1
7	4*	0
8	6	4
9	6	7

11,K,-2

0	19	25
1	4*	11
2	19	18
3	4*	9
4	8	10
5	4*	1
6	4*	0
7	4*	7

12,K,-2

0	8	6
1	6	1
2	4*	0
3	4*	8
4	7	5
5	3*	0

0,K,-3

0	6	0

LIST F/O/ F/C/ (*100) OF 1-PHENYL-2-(2-THIENYL)ETHYLEN

Tab. 9

0,K,-3

1	6	0
2	240	287
3	7	0
4	412	424
5	8	0
6	152	146
7	9	0
8	97	96
9	10	0
10	17	14
11	10	0
12	10	21
13	9	0
14	10	9

1,K,-3

0	6	0
1	61	67
2	177	149
3	318	296
4	435	420
5	24	23
6	53	61
7	20	21
8	68	72
9	22	21
10	21	22
11	11	7
12	28	35
13	32	36
14	4*	1

2,K,-3

0	6	0
1	102	101
2	40	43
3	66	69
4	241	228
5	19	19
6	34	24
7	56	56
8	99	105
9	57	57
10	9	14
11	17	20
12	4*	2
13	19	18

3,K,-3

0	7	0
1	135	147
2	76	72
3	113	121
4	72	74
5	158	164
6	45	42
7	30	37
8	64	67
9	13	19
10	8	9
11	20	24
12	21	19
13	34	41

4,K,-3

0	7	0
1	158	152
2	161	157
3	26	19
4	75	83
5	59	66
6	52	72
7	12	16
8	28	26
9	12	18
10	14	20
11	27	24
12	9	9
13	15	12

5,K,-3

0	8	0
1	9	5
2	48	51
3	41	41
4	115	124
5	75	75
6	42	34
7	33	41
8	24	27
9	4*	11
10	7	2
11	4*	2
12	25	34

6,K,-3

0	9	0
1	16	3
2	91	90
3	10	9
4	85	87
5	16	20
6	85	85
7	30	30
8	16	14
9	8	3
10	4*	0
11	11	10
12	24	21

7,K,-3

0	10*	0
1	4*	1
2	33	38
3	52	49
4	69	59
5	24	21
6	15	15
7	36	35
8	13	15
9	21	20
10	19	22
11	32	28

8,K,-3

0	10	0
1	11	5
2	12	14
3	14	23
4	10	11
5	9	12
6	21	18
7	4*	0
8	21	17
9	4*	11
10	7	8

9,K,-3

0	10	0
1	28	32
2	13	11
3	16	19
4	4*	3
5	17	17
6	6	4
7	9	14
8	10	9
9	9	6

10,K,-3

0	10*	0
1	4*	1
2	18	21
3	12	11
4	16	13
5	4*	7
6	17	15
7	4*	11
8	6	2

11,K,-3

0	9	0
1	8	1
2	11	7
3	6	2
4	11	14
5	6	9
6	4*	2

12,K,-3

	4*	3
		)
3	4*	6

0,K,-4

0	19	3
1	7	0
2	580	566
3	8	0
4	102	96
5	9	0
6	79	75
7	10	0
8	79	70
9	10	0
10	63	71
11	10	0
12	34	32

1,K,-4

0	60	54
1	18	24
2	174	172
3	110	95
4	100	90
5	63	53
6	4*	3
7	6	10
8	13	18
9	4*	10
10	19	27
11	9	3
12	4*	8
13	4*	3

2,K,-4

0	175	179
1	164	175
2	184	187
3	36	36
4	115	118
5	140	132
6	74	66
7	66	67
8	21	25
9	10	19
10	57	61
11	41	46
12	4*	4
13	16	11

3,K,-4

0	114	110
1	29	35
2	9	5
3	103	113
4	17	2
5	40	38
6	15	11
7	9	6
8	38	37
9	7	11
10	37	34
11	17	25
12	18	20
13	4*	11

4,K,-4

0	4*	7
1	72	70
2	39	38
3	54	60
4	48	49
5	22	30
6	90	98
7	61	66
8	39	35
9	34	34
10	17	21
11	24	30
12	10	9

5,K,-4

0	158	162
1	16	10
2	13	15
3	47	45
4	39	51
5	24	24
6	35	35
7	29	35
8	4*	5
9	9	8
10	15	9
11	6	4
12	4*	7

6,K,-4

0	68	73
1	18	17
2	92	91
3	14	12
4	32	28
5	66	70
6	83	80
7	28	27
8	15	15
9	4*	1
10	45	40
11	11	6

7,K,-4

0	9	1
1	16	16
2	10	17
3	9	11
4	19	10

LIST F/O/ F/C/ (*100) OF 1-PHENYL-2-(2-THIENYL)ETHYLEN

Tab. 9

7,K,-4

5	5*	3
6	14	9
7	23	23
8	4*	3
9	4*	1
10	8	7

8,K,-4

0	26	24
1	8	4
2	34	30
3	19	18
4	9	9
5	27	27
6	4*	1
7	16	19
8	10	9
9	13	11
10	10	10

9,K,-4

0	25	26
1	4*	3
2	4*	9
3	8	6
4	4*	6
5	4*	2
6	4*	2
7	10	7
8	8	8

10,K,-4

0	13	8
1	11	4
2	17	20
3	12	17
4	4*	3
5	4*	1
6	10	5
7	13	9

11,K,-4

0	4*	8
1	4*	5
2	4*	4
3	6	4
4	6	4
5	4*	1

0,K,-5

0	9	0
1	9	0
2	63	71
3	9	0
4	55	47
5	10	0
6	120	112
7	10	0
8	12	12
9	10	0
10	18	13
11	9	0
12	12	10

1,K,-5

0	9	0
1	27	33
2	4*	1
3	120	115
4	231	217
5	24	19
6	78	74
7	11	9
8	31	33
9	14	12
10	18	19
11	4*	2
12	23	25

2,K,-5

0	9	0
1	7	7
2	82	79
3	105	101
4	4*	5
5	134	132
6	107	109
7	36	29
8	15	19
9	22	20
10	28	31
11	27	29
12	6	8

3,K,-5

0	9	0
1	31	33
2	26	23
3	58	58
4	6	1
5	56	60
6	14	11
7	45	45
8	27	21
9	4*	9
10	4*	9
11	19	18
12	7	7

4,K,-5

0	10	0
1	70	74
2	37	30
3	108	115
4	22	26
5	38	37
6	18	27
7	29	24
8	4*	2
9	4*	3
10	16	13
11	8	11

5,K,-5

0	10	0
1	9	14
2	10	7
3	15	11
4	112	113
5	42	38
6	35	38
7	16	18
8	8	2
9	4*	7
10	4*	7
11	10	4

6,K,-5

0	10	0
1	16	6
2	10	7
3	22	20
4	44	38
5	5*	2
6	5*	0
7	4*	3
8	6	7
9	25	20
10	16	18

7,K,-5

0	10	0
1	5*	3
2	21	24
3	18	17
4	48	47
5	4*	3
6	23	21
7	26	27
8	9	5
9	11	11

8,K,-5

0	10	0
1	5*	15
2	19	19
3	16	8
4	13	11
5	29	32
6	11	11
7	4*	0
8	4*	1

9,K,-5

1	17	18
2	4*	1
3	4*	5
4	9	8
5	9	9
6	4*	2
7	6	4

10,K,-5

1	4*	2
2	4*	6
3	6	1
4	6	4
5	7	9

11,K,-5

1	4*	1
2	7	5

0,K,-6

0	73	80
2	90	89
4	12	13
6	31	36
8	8	6
10	7	12

1,K,-6

0	195	200
1	40	39
2	59	51
3	56	57
4	94	90
5	66	62
6	34	29
7	19	20
8	30	33
9	16	21
10	24	19
11	4*	7

2,K,-6

0	12	9
1	22	24
2	6	9
3	11	9
4	19	21
5	50	53
6	36	38
7	13	18
8	16	17
9	28	25
10	14	15
11	11	13

3,K,-6

0	58	55
1	62	61
2	19	21
3	70	73
4	8	15
5	63	64
6	35	32
7	48	51
8	24	24
9	17	18
10	22	24
11	20	33

4,K,-6

0	8	8
1	34	35
2	42	46
3	10	6
4	27	31
5	21	21
6	19	21
7	4*	2
8	4*	3
9	4*	10
10	4*	9

5,K,-6

0	8	16
1	4*	4
2	69	72
3	41	36
4	24	29
5	17	20
6	8	9
7	7	7
8	36	30
9	25	24
10	12	16

6,K,-6

0	5*	7
1	9	9
2	35	38
3	5*	6
4	15	13
5	19	15
6	17	19
7	21	19
8	14	12
9	4*	7

7,K,-6

0	36	40

LIST F/O/ F/C/ (*100) OF 1-PHENYL-2-(2-THIENYL)ETHYLEN

Tab. 9

7,K,-6

1	17	16
2	26	18
3	4*	6
4	7	9
5	15	12
6	16	16
7	21	21
8	14	16

8,K,-6

0	4*	1
1	13	13
2	7	6
3	4*	5
4	4*	4
5	4*	4
6	9	5
7	7	6

9,K,-6

0	11	8
1	4*	5
2	4*	1
3	4*	7
4	4*	1
5	4*	2

10,K,-6

0	4*	4
1	4*	7
1	4*	7
2	8	11

0,K,-7

2	42	43
4	58	50
6	61	61
8	12	11
10	7	10

1,K,-7

1	28	33
2	52	52
3	4*	1
4	15	11
5	35	36
6	25	24
7	19	20
8	24	22
9	8	7

2,K,-7

1	4*	3
2	38	38
3	37	34
4	4*	2
5	53	55
6	53	56
7	45	38
8	10	12
9	4*	11

3,K,-7

1	32	34
2	7	9
3	33	33
4	19	24
5	31	31
6	17	11
7	43	45
8	10	16
9	16	18

4,K,-7

1	43	47
2	4*	1
3	47	51
4	31	33
5	7	7
6	4*	1
7	7	3
8	6	7

5,K,-7

1	15	21
2	27	26
3	17	13
4	19	19
5	4*	1
6	13	7
7	9	8
8	7	4

6,K,-7

1	5*	2
2	12	12
3	15	14
4	37	37
5	4*	4
6	14	12
7	4*	0

7,K,-7

1	6	4
2	4*	7
3	10	10
4	4*	1
5	10	10
6	11	10

8,K,-7

1	4*	4
2	9	8
3	4*	0
4	4*	5

0,K,-8

0	74	79
2	41	37
4	4*	3
6	4*	7
8	18	19

1,K,-8

0	20	23
1	10	12
2	10	14
3	14	16
4	21	19
5	28	26
6	16	13
7	7	6

2,K,-8

0	32	26
1	36	39
2	32	37
3	4*	0
4	8	3
5	4*	9
6	9	11
7	26	33

Orts- und Temperaturparameter des 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophens. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung. (Die Temperaturfakt. x 100 $Å^2$).

Atom		x	y	z	U_{11} oder U	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
S	1	.0735(1)	1.0521(4)	.1560(3)	4.9(1)	6.3(2)	4.3(1)	.2(1)	.6(1)	1.1(1)
S	2	.3618(1)	.9240(0)	.8516(3)	4.9(1)	5.9(2)	4.5(1)	-.7(1)	.5(1)	.8(1)
S	3	.6287(1)	.7686(4)	1.6534(4)	6.3(1)	6.8(2)	5.8(1)	-.2(1)	.3(1)	.6(1)
C	1	-.0257(5)	1.049 (1)	.024 (1)	6.5(4)	5.9(5)	4.0(3)	1.1(4)	-.1(3)	.4(4)
C	2	-.0718(5)	.958 (1)	.162 (2)	4.7(4)	5.3(5)	6.9(5)	.4(4)	-.2(4)	-.9(4)
C	3	-.0246(4)	.891 (1)	.373 (1)	4.4(3)	4.2(4)	4.1(3)	.3(3)	1.1(3)	.3(3)
C	4	.0580(4)	.934 (1)	.396 (1)	4.6(3)	4.4(4)	4.0(3)	1.0(3)	.2(3)	-.4(3)
C	5	.1224(5)	.889 (1)	.595 (1)	5.6(4)	5.7(5)	3.8(3)	.2(4)	-.1(3)	.3(3)
C	6	.1991(4)	.928 (1)	.624 (1)	5.0(3)	5.1(4)	3.9(3)	.3(3)	.5(3)	.0(3)
C	7	.2601(4)	.878 (1)	.832 (1)	3.9(3)	4.7(4)	4.0(3)	-.2(3)	-.1(3)	-.0(3)
C	8	.2498(4)	.793 (1)	1.029 (1)	3.7(3)	5.9(5)	5.6(4)	-.1(3)	.6(3)	.3(4)
C	9	.3209(4)	.762 (1)	1.197 (1)	4.7(4)	4.8(4)	4.9(4)	.2(3)	.0(3)	-.3(4)
C	10	.3895(5)	.828 (1)	1.123 (1)	4.9(4)	4.6(4)	5.1(4)	.3(3)	-.2(3)	-.4(3)
C	11	.4694(5)	.817 (1)	1.268 (1)	5.5(4)	5.2(4)	4.9(4)	-.3(4)	.5(3)	.3(3)
C	12	.5369(5)	.887 (1)	1.225 (1)	5.6(4)	5.2(4)	4.4(4)	.1(4)	.8(3)	.2(3)
C	13	.6157(4)	.870 (1)	1.383 (1)	4.8(4)	4.7(4)	5.0(4)	-.1(3)	.5(3)	-.9(3)
C	14	.6874(5)	.929 (1)	1.337 (1)	5.6(4)	4.5(4)	3.4(3)	-.5(3)	1.5(3)	-.8(3)
C	15	.7537(5)	.891 (2)	1.531 (2)	4.1(4)	7.9(6)	7.9(6)	.4(4)	1.6(4)	-1.8(6)
C	16	.7300(6)	.807 (2)	1.708 (2)	5.4(5)	7.4(7)	7.5(7)	2.4(5)	-2.1(5)	-1.2(6)
H	1	-.037 (5)	1.10 (1)	-.10 (1)	5.0(0)					
H	2	-.124 (4)	.95 (1)	.12 (1)	5.0(0)					
H	3	-.033 (-)	.84 (-)	.53 (-)	5.0(0)					
H	5	.110 (5)	.83 (1)	.69 (1)	5.0(0)					
H	6	.224 (5)	.98 (1)	.52 (1)	5.0(0)					
H	8	.203 (-)	.79 (-)	1.08 (-)	5.0(0)					
H	9	.307 (5)	.71 (1)	1.36 (1)	5.0(0)					
H	11	.478 (4)	.72 (1)	1.44 (1)	5.0(0)					
H	12	.536 (4)	.89 (1)	1.06 (1)	5.0(0)					
H	14	.690 (-)	.96 (-)	1.20 (-)	5.0(0)					
H	15	.827 (5)	.92 (1)	1.51 (1)	5.0(0)					
H	16	.744 (6)	.78 (2)	1.82 (2)	5.0(0)					

Tab. 10

Tab. 11

Bindungslängen und -winkel des 2,5-Bis(2-thienylvinyl)thiophens. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung.

S (1) - C (1)	1,687 (8) Å	S (3) - C(16)	1,695 (9) Å
S (1) - C (4)	1,709 (8)	S (3) - C(13)	1,715 (8)
C (1) - C (2)	1,394 (10)	C(16) - C(15)	1,320 (14)
C (2) - C (3)	1,410 (10)	C(15) - C(14)	1,459 (9)
C (3) - C (4)	1,404 (9)	C(14) - C(13)	1,370 (10)
C (4) - C (5)	1,452 (9)	C(13) - C(12)	1,453 (9)
C (5) - C (6)	1,300 (10)	C(12) - C(11)	1,326 (10)
C (6) - C (7)	1,460 (8)	C(11) - C(10)	1,440 (10)
C (7) - C (8)	1,357 (10)	C(10) - C (9)	1,388 (10)
S (2) - C (7)	1,725 (7)	S (2) - C(10)	1,705 (7)
C (8) - C (9)	1,394 (9)		
C (1) - H (1)	0,809 (8)	C(16) - H(16)	0,867 (10)
C (2) - H (2)	0,875 (7)	C(15) - H(15)	1,282 (8)
C (3) - H (3)	0,900 (-)	C(14) - H(14)	0,900 (-)
C (5) - H (5)	0,800 (8)	C(12) - H(12)	0,924 (7)
C (6) - H (6)	0,900 (8)	C(11) - H(11)	1,201 (8)
C (8) - H (8)	0,900 (-)	C (9) - H (9)	1,118 (8)
C (1) - S (1) - C (4)	93,5 (4)°	C(16) - S (3) - C(13)	91,9 (4)°
C (2) - C (1) - S (1)	111,1 (6)	S (3) - C(16) - C(15)	112,8 (6)
C (3) - C (2) - C (1)	113,0 (6)	C(16) - C(15) - C(14)	113,4 (7)
C (4) - C (3) - C (2)	111,7 (6)	C(15) - C(14) - C(13)	110,0 (6)
S (1) - C (4) - C (3)	110,7 (5)	C(14) - C(13) - S (3)	111,9 (5)
S (1) - C (4) - C (5)	123,4 (5)	C(12) - C(13) - S (3)	123,1 (6)
C (3) - C (4) - C (5)	125,8 (6)	C(14) - C(13) - C(12)	125,0 (7)
C (4) - C (5) - C (6)	128,2 (7)	C(13) - C(12) - C(11)	123,6 (7)
C (5) - C (6) - C (7)	124,8 (7)	C(12) - C(11) - C(10)	127,1 (7)
C (6) - C (7) - C (8)	128,7 (6)	C(11) - C(10) - C (9)	122,4 (7)
C (6) - C (7) - S (2)	122,0 (5)	C(11) - C(10) - S (2)	127,7 (6)
C (8) - C (7) - S (2)	109,3 (4)	C (9) - C(10) - S (2)	109,9 (9)
C (7) - C (8) - C (9)	114,8 (7)	C(10) - C (9) - C (8)	112,6 (7)
C (7) - S (2) - C(10)	93,4 (3)		

-20,0,L

2	12	11
1	30	28

-19,0,L

3	19	16
2	7	6
1	38	40

-18,0,L

4	4*	1
3	42	36
2	60	59
1	38	33

-17,0,L

5	4*	4
4	15	15
3	49	50
2	11	6
1	16	12

-16,0,L

5	20	28
4	105	106
3	19	13
2	128	142
1	37	27

-15,0,L

5	14	15
4	5*	9
3	85	89
2	42	54
1	12	18

-14,0,L

5	28	20
4	93	102
3	93	99
2	76	70
1	70	75

-13,0,L

6	4*	3
5	12	12
4	80	81
3	45	45
2	66	70
1	31	35

-12,0,L

6	35	38
5	53	55
4	165	165
3	189	208
2	113	106
1	29	32

-11,0,L

6	5*	6
5	15	7
4	24	25
3	183	177
2	42	69
1	20	18

-10,0,L

6	26	29
5	46	39
4	91	86
3	50	52
2	185	187
1	250	245

-9,0,L

6	21	16
5	94	85
4	319	295
3	14	11
2	323	301
1	150	128

-8,0,L

6	15	15
5	24	22
4	52	47
3	68	79
2	213	180
1	46	44

-7,0,L

6	126	112
5	5*	3
4	110	99
3	162	136
2	240	208
1	208	186

-6,0,L

6	5*	8
5	35	29
4	66	74
3	220	186
2	226	176
1	77	74

-5,0,L

7	34	26
6	80	79
5	41	44
4	163	161
3	275	273
2	389	348
1	89	67

-4,0,L

7	25	33
6	37	25
5	15	20
4	165	169
3	119	104
2	187	195
1	145	189

-3,0,L

7	26	25
6	93	93
5	132	116
4	211	206
3	4*	9
2	123	96
1	259	242

-2,0,L

6	83	84
5	34	38
4	179	175
3	26	33
2	318	323
1	155	124

-1,0,L

6	5*	4
5	129	127
4	46	41
3	107	127
2	256	227
1	26	63

0,0,L

6	126	133
5	97	97
4	319	311
3	94	81
2	279	270
1	13	8

1,0,L

6	15	0
5	23	27
4	104	101
3	12	13
2	276	287
1	79	53
0	46	62

2,0,L

6	37	30
5	89	99
4	99	114
3	65	54
2	349E	404
1	82E	136
0	18	22

3,0,L

6	106	115
5	127	123
4	169	177
3	6	8
2	131	111
1	9	12
0	564	581

4,0,L

6	78	71
5	44	44
4	298	333
3	92	69
2	118	107
1	100	119
0	147	164

5,0,L

6	62	61
5	26	24
4	14	13
3	49	57
2	66	37
1	231	238
0	42	24

6,0,L

6	40	33
5	24	11
4	5*	0
3	100	104
2	74	92
1	142	145
0	195	221

7,0,L

5	24	26
4	258	282
3	190	190
2	16	20
1	7	11
0	504	482

8,0,L

5	15	15
4	29	26
3	80	90
2	18	9
1	39	48
0	220	222

9,0,L

5	39	44
4	57	61
3	59	57
2	316	339
1	80	85
0	215	210

10,0,L

5	44	38
4	76	70
3	125	124
2	149	145
1	72	70
0	197	196

11,0,L

5	14	17
4	110	93
3	31	27
2	172	150
1	163	140
0	203	215

12,0,L

4	18	26
3	46	41
2	165	163
1	239	235
0	110	101

13,0,L

4	9	11
3	46	44
2	186	170
1	34	20
0	140	136

14,0,L

4	72	60
3	105	93
2	20	24
1	57	48
0	8*	17

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5-BIS(2-THIENYLVINYL)THIOPHENE

Tab. 12

15,0,L

2	42	30
1	26	31
0	33	33

16,0,L

	5	21	23
3	6	5
2	110	108
1	71	65
0	136	143

17,0,L

2	23	23
1	4*	4
0	20	22

18,0,L

2	28	30
1	33	30
0	107	109

19,0,L

1	74	69
0	28	30

20,0,L

0	67	56

-20,1,L

2	33	28
1	45	49

-19,1,L

3	6	9
2	64	64
1	42	37

-18,1,L

4	14	19
3	41	42
2	25	23
1	61	62

-17,1,L

4	38	42
3	39	43
2	34	33
1	70	72

-16,1,L

5	32	30
4	8	7
3	29	28
2	23	24
1	43	44

-15,1,L

4	36	37
3	55	62
2	137	143
1	128	127

-14,1,L

5	51	56
4	74	74
3	78	87
2	65	70
1	201	215

-13,1,L

6	16	16
5	48	55
4	121	121
3	60	68
2	88	100
1	161	170

-12,1,L

6	26	33
5	59	64
4	65	64
3	96	103
2	124	136
1	70	75

-11,1,L

6	48	53
5	143	143
4	72	70
3	87	85
2	48	50
1	192	190

-10,1,L

6	52	48
5	111	97
4	117	107
3	105	92
2	94	95
1	215	219

-9,1,L

6	14	11
5	86	74
4	91	76
3	68	60
2	55	50
1	172	174

-8,1,L

6	87	86
5	142	131
4	38	34
3	78	76
2	195	172
1	352	379

-7,1,L

6	29	29
5	98	94
4	46	48
3	10	20
2	126	101
1	292	318

-6,1,L

6	10	13
5	118	111
4	215	209
3	84	99
2	135	136
1	295	276

-5,1,L

6	35	27
5	96	87
4	79	78
3	205	195
2	84	91
1	239	179

-4,1,L

6	43	42
5	106	96
4	68	68
3	302	280
2	188	192
1	169	164

-3,1,L

6	75	72
5	86	86
4	170	168
3	310	309
2	285	268
1	108	76

-2,1,L

6	20	22
5	99	101
4	80	76
3	344	353
2	216	198
1	795	768

-1,1,L

6	54	53
5	189	195
4	52	47
3	373	360
2	351	375
1	422	418

0,1,L

6	41	39
5	107	114
4	21	18
3	35	44
2	74	96
1	291	272

1,1,L

6	5*	6
5	71	75
4	205	220
3	137	117
2	238	237
1	470	500
0	194	240

2,1,L

6	25	25
5	13	12
4	130	138
3	354	353
2	111	105
1	186	202
0	167	182

3,1,L

6	70	78
5	22	31
4	51	57
3	44	59
2	319	307
1	151	181
0	264	271

4,1,L

6	24	23
5	25	23
4	81	87
3	169	177
2	102	104
1	282	304
0	110	115

5,1,L

6	28	30
5	72	79
4	33	37
3	230	247
2	182	197
1	269	296
0	161	124

6,1,L

6	50	51
5	61	69
4	14	9
3	219	255
2	281	290
1	315	340
0	244	232

7,1,L

5	77	82
4	61	66
3	82	100
2	66	82
1	183	189
0	219	185

8,1,L

5	89	89
4	130	147
3	24	30
2	170	189
1	354	333
0	259	230

9,1,L

5	24	17
4	45	41
3	87	194
2	63	56
1	304	274
0	43	53

10,1,L

5	40	40
4	63	61
3	125	115
2	107	100
1	73	73
0	254	245

11,1,L

5	44	43
4	28	32

11,1,L

3	88	82
2	6*	8
1	206	202
0	146	135

12,1,L

4	54	48
3	21	23
2	60	53
1	107	97
0	21	18

13,1,L

4	4*	6
3	62	57
2	59	55
1	194	187
0	156	157

14,1,L

4	46	42
3	72	67
2	23	23
1	66	64
0	106	114

15,1,L

3	41	36
2	73	69
1	93	86
0	50	49

16,1,L

3	11	11
2	46	40
1	58	49
0	32	27

17,1,L

2	41	36
1	64	58
0	65	62

18,1,L

1	18	19
0	19	21

19,1,L

1	65	65
0	32	32

-19,2,L

3	32	36
2	41	39
1	42	42

-18,2,L

4	24	28
3	51	51
2	9	9
1	35	34

-17,2,L

4	63	68
3	55	62
2	47	49
1	55	57

-16,2,L

5	37	44
4	27	28
3	32	30
2	71	74
1	42	50

-15,2,L

5	27	27
4	63	72
3	26	25
2	42	49
1	48	49

-14,2,L

5	35	40
4	62	68
3	118	127
2	14	13
1	42	52

-13,2,L

5	49	55
4	15	11
3	78	84
2	108	107
1	69	67

-12,2,L

6	34	27
5	18	24
4	113	109
3	63	60
2	78	90
1	100	109

-11,2,L

6	28	29
5	88	75
4	29	30
3	227	221
2	128	131
1	81	78

-10,2,L

6	24	25
5	52	50
4	159	148
3	141	126
2	219	230
1	38	15

-9,2,L

6	19	14
5	50	44
4	116	91
3	62	58
2	124	110
1	230	251

-8,2,L

6	57	48
5	23	20
4	163	151
3	188	167
2	164	133
1	173	187

-7,2,L

6	33	33
5	38	38
4	106	105
3	303	284
2	73	47
1	177	156

-6,2,L

6	66	56
5	83	82
4	35	24
3	80	78
2	251	220
1	81	66

-5,2,L

6	61	54
5	129	125
4	103	101
3	102	85
2	105	92
1	254	221

-4,2,L

6	29	31
5	93	86
4	154	160
3	214	211
2	201	184
1	368	304

-3,2,L

6	57	58
5	20	15
4	64	54
3	102	109
2	173	180
1	304	279

-2,2,L

6	62	68
5	95	89
4	40	25
3	56	62
2	92	62
1	636	623

-1,2,L

6	64	66
5	158	158
4	176	172
3	81	69
2	110	96
1	605	615

0,2,L

6	31	36
5	47	43
4	181	170
3	229	244
2	147	136
1	309	301

1,2,L

6	78	68
5	79	85
4	78	82
3	190	190
2	246	264
1	376	387
0	449E	584

2,2,L

6	61	75
5	162	173
4	29	29
3	84	95
2	80	94
1	224	241
0	311	347

3,2,L

6	38	40
5	41	44
4	186	203
3	71	80
2	23	35
1	197	229
0	225	161

4,2,L

6	57	48
5	66	75
4	73	73
3	96	105
2	112	119
1	170	201
0	42	43

5,2,L

6	48	42
5	127	136
4	162	178
3	128	142
2	100	96
1	207	209
0	172	158

6,2,L

6	10	7
5	90	95
4	108	113
3	176	192
2	60	57
1	117	127
0	86	71

7,2,L

5	21	15
4	84	84
3	130	143
2	91	94
1	122	140
0	212	178

8,2,L

5	32	31
4	90	94
3	130	143
2	132	150
1	25	31
0	408	384

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5-BIS(2-THIENYLVINYL)THIOPHENE

Tab. 12

9,2,L

4	37	34
3	130	134
2	98	82
1	110	101
0	51	37

10,2,L

5	33	28
4	76	65
3	126	119
2	203	189
1	139	127
0	110	115

11,2,L

4	17	14
3	109	97
2	247	219
1	233	220
0	95	92

12,2,L

4	59	50
3	69	61
2	90	80
1	64	50
0	147	149

13,2,L

4	48	46
3	69	56
2	78	68
1	64	58
0	26	23

14,2,L

3	60	62
2	70	57
1	124	127
0	148	149

15,2,L

3	47	46
2	42	41
1	62	61
0	45	43

16,2,L

2	53	49
1	24	24
0	57	57

17,2,L

2	69	67
1	72	75
0	41	44

18,2,L

1	74	71
0	52	54

19,2,L

0	64	64

-19,3,L

2	45	54
1	33	31

-18,3,L

3	23	19
2	24	24
1	53	52

-17,3,L

4	15	18
3	48	51
2	29	27
1	13	9

-16,3,L

4	18	17
3	55	63
2	98	101
1	65	69

-15,3,L

5	40	46
4	43	50
3	36	44
2	62	60
1	49	57

-14,3,L

5	82	89
4	16	16
3	14	13
2	65	72
1	126	132

-13,3,L

5	34	38
4	42	42
3	47	43
2	83	88
1	42	39

-12,3,L

5	14	13
4	57	62
3	78	79
2	112	123
1	148	166

-11,3,L

6	4*	1
5	64	69
4	54	46
3	57	53
2	123	136
1	96	92

-10,3,L

6	16	20
5	69	58
4	68	69
3	92	86
2	51	59
1	49	52

-9,3,L

6	122	112
5	30	34
4	122	108
3	73	65
2	246	243
1	160	171

-8,3,L

6	50	47
5	59	55
4	64	51
3	115	115
2	104	88
1	63	72

-7,3,L

6	30	23
5	59	74
4	144	134
3	31	38
2	93	94
1	129	131

-6,3,L

6	51	47
5	48	46
4	146	137
3	46	46
2	83	80
1	36	30

-5,3,L

6	83	73
5	54	55
4	158	148
3	93	83
2	88	102
1	116	122

-4,3,L

6	25	28
5	27	25
4	189	179
3	79	81
2	159	157
1	80	65

-3,3,L

6	59	58
5	20	19
4	145	140
3	77	88
2	552	535
1	192	163

-2,3,L

6	129	126
5	35	30
4	176	170
3	192	182
2	190	185
1	362	321

-1,3,L

6	43	38
5	11	7
4	60	71
3	18	23
2	225	235
1	361	344

0,3,L

6	47	48
5	60	62
4	171	175
3	57	52
2	425	427
1	115	109

1,3,L

6	24	24
5	33	34
4	161	165
3	72	65
2	128	128
1	119	140
0	84	101

2,3,L

6	51	54
5	47	51
4	55	62
3	192	190
2	112	102
1	91	74
0	203	227

3,3,L

6	41	39
5	35	46
4	97	100
3	197	209
2	273	266
1	123	136
0	93	79

4,3,L

6	81	78
5	38	47
4	74	76
3	30	42
2	250	267
1	50	33
0	153	126

5,3,L

5	49	50
4	53	59
3	143	157
2	59	54
1	174	180
0	345	337

6,3,L

5	46	52
4	46	52
3	63	68
2	101	106
1	232	242
0	313	294

7,3,L

5	71	73
4	32	32
3	58	64
2	288	334
1	153	148
0	167	145

Tab. 12

8,3,L

4	95	96
3	52	58
2	143	156
1	154	140
0	38	41

9,3,L

5	5*	1
4	116	107
3	130	129
2	45	45
1	178	147
0	256	238

10,3,L

4	51	44
3	71	66
2	143	130
1	127	103
0	126	120

11,3,L

4	26	29
3	61	57
2	102	85
1	10	9
0	109	106

12,3,L

4	49	46
3	59	55
2	38	40
1	58	49
0	202	208

13,3,L

3	9	9
2	55	50
1	92	88
0	187	188

14,3,L

3	6	9
2	69	63
1	46	44
0	32	38

15,3,L

3	14	11
2	74	64
1	51	54
0	34	33

16,3,L

2	24	19
1	51	50
0	102	100

17,3,L

1	25	26
0	19	19

18,3,L

1	34	33
0	64	54

19,3,L

0	19	21

-18,4,L

2	28	28
1	25	28
0	16	20

-17,4,L

3	47	52
2	35	29
1	62	64

-16,4,L

4	19	21
3	23	26
2	25	24
1	48	55

-15,4,L

4	54	61
3	70	69
2	17	16
1	70	70

-14,4,L

5	39	45
4	5*	9
3	20	23
2	39	42
1	7	7

-13,4,L

5	52	55
4	45	49
3	68	75
2	72	79
1	34	31

-12,4,L

5	23	22
4	48	58
3	28	27
2	44	47
1	77	79

-11,4,L

5	22	26
4	56	61
3	127	130
2	154	167
1	85	88

-10,4,L

5	67	63
4	13	15
3	122	116
2	136	138
1	118	137

-9,4,L

6	47	44
5	46	39
4	56	51
3	26	23
2	52	43
1	119	127

-8,4,L

6	14	16
5	44	40
4	82	76
3	244	220
2	85	75
1	189	216

-7,4,L

6	23	16
5	40	33
4	30	29
3	118	107
2	54	55
1	18	17

-6,4,L

6	69	67
5	117	109
4	70	67
3	135	126
2	212	191
1	22	19

-5,4,L

6	5*	7
5	34	27
4	32	29
3	35	37
2	154	140
1	107	95

-4,4,L

6	51	41
5	86	86
4	28	28
3	38	43
2	181	178
1	333	285

-3,4,L

6	52	54
5	83	71
4	48	50
3	105	109
2	330	312
1	174	164

-2,4,L

6	59	57
5	35	28
4	87	82
3	62	68
2	91	82
1	178	171

-1,4,L

6	51	55
5	114	116
4	20	23
3	109	110
2	93	102
1	583	571

0,4,L

6	31	27
5	45	42
4	83	79
3	74	80
2	19	32
1	180	171
0	102	82

1,4,L

6	60	73
5	97	107
4	39	42
3	205	209
2	90	80
1	141	134
0	35	41

2,4,L

6	46	51
5	70	70
4	24	29
3	72	74
2	39	42
1	207	217
0	120	105

3,4,L

5	106	108
4	105	105
3	42	47
2	164	162
1	173	209
0	95	92

4,4,L

5	76	87
4	72	75
3	43	47
2	139	145
1	14	16
0	125	118

5,4,L

5	48	45
4	28	33
3	152	172
2	76	86
1	19	20
0	59	53

6,4,L

5	118	113
4	87	101
3	45	52
2	92	100
1	175	190
0	186	170

7,4,L

5	27	20
4	57	56
3	37	39
2	69	76
1	62	64
0	109	100

8,4,L

5	34	32
4	28	23
3	186	197

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5-BIS(2-THIENYLVINYL)THIOPHENE

Tab. 12

8,4,L

2	104	104
1	17	18
0	110	85

9,4,L

4	14	14
3	51	49
2	50	50
1	76	75
0	100	87

10,4,L

4	57	53
3	100	89
2	139	114
1	206	198
0	29	41

11,4,L

4	28	21
3	84	75
2	166	149
1	124	125
0	15	11

[illegible]

3	84	71
2	36	34
1	47	45
0	73	69

[illegible]

3	29	32
2	45	46
1	83	73
0	83	82

14,4,L

3	19	13
2	27	29
1	91	87
0	73	71

15,4,L

2	58	55
1	49	46
0	55	55

16,4,L

2	18	17
1	16	13
0	20	19

17,4,L

1	81	80
0	42	44

18,4,L

0	17	20

-17,5,L

2	71	72
1	30	29

-16,5,L

3	67	72
2	33	32
1	46	52

-15,5,L

3	8	7
2	41	42
1	24	28

-14,5,L

4	4*	8
3	18	21
2	55	59
1	90	95

-13,5,L

4	39	38
3	33	34
2	28	29
1	29	32

-12,5,L

4	45	47
3	50	52
2	57	70
1	30	31

-11,5,L

5	37	41
4	26	27
3	40	44
2	84	88
1	136	146

-10,5,L

5	25	28
4	49	49
3	10	11
2	67	75
1	36	36

-9,5,L

5	25	24
4	59	55
3	107	102
2	103	105
1	54	61

-8,5,L

5	29	19
4	48	42
3	67	65
2	78	76
1	61	64

-7,5,L

5	125	114
4	22	23
3	60	54
2	78	73
1	116	123

-6,5,L

5	33	31
4	27	26
3	66	57
2	58	61
1	37	40

-5,5,L

5	13	21
4	70	65
3	236	223
2	60	59
1	42	34

-4,5,L

5	88	84
4	98	95
3	67	69
2	102	100
1	148	142

-3,5,L

5	34	33
4	85	76
3	116	112
2	280	254
1	53	43

-2,5,L

5	45	43
4	73	70
3	175	170
2	97	95
1	97	91

-1,5,L

5	35	38
4	20	23
3	53	48
2	178	180
1	59	58

0,5,L

5	82	77
4	61	59
3	76	77
2	193	187
1	155	159

1,5,L

[illegible]		
4	22	23
3	60	54
5	14	18
4	86	91
3	27	27
2	31	32
1	67	69
0	7*	75

[illegible]

[illegible]		
[illegible]		
[illegible]		
5	26	24
[illegible]		
[illegible]		

3,5,L

5	39	45
4	54	55
3	41	35
2	123	123
1	83	81
0	123	125

4,5,L

5	61	66
4	41	36
3	87	94
2	73	74
1	118	124
0	102	94

5,5,L

5	31	26
4	22	21
3	105	110
2	137	151
1	192	213
0	142	135

6,5,L

5	5*	4
4	20	22
3	27	23
2	91	105
1	18	16
0	99	92

7,5,L

4	41	42
3	21	21
2	136	151
1	176	166
0	118	121

8,5,L

4	103	92
3	16	15
2	109	109
1	85	75
0	31	28

9,5,L

4	59	49
3	69	65
2	41	38
1	153	144
0	97	90

10,5,L

4	28	24
3	48	44
2	73	65
1	71	62
0	141	134

11,5,L

3	61	57
2	5*	4
1	57	56
0	41	40

12,5,L

3	30	28
2	50	45
1	122	112
0	108	104

13,5,L

2	18	20

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5-BIS(2-THIENYLVINYL)THIOPHENE

Tab. 12

13,5,L

1	51	49
0	110	111

14,5,L

2	33	27
1	31	28
0	36	37

15,5,L

1	23	26
0	20	19

16,5,L

1	48	43
0	45	46

-15,6,L

2	16	19
1	53	51

-14,6,L

3	32	35
2	40	40
1	33	37

-13,6,L

3	29	32
2	67	68
1	4*	6

-12,6,L

3	44	50
2	40	38
1	35	31

-11,6,L

4	30	33
3	62	67
2	22	23
1	48	52

-10,6,L

4	21	20
3	23	27
2	83	89
1	24	23

-9,6,L

4	56	53
3	24	25
2	88	93
1	126	135

-8,6,L

5	64	61
4	26	25
3	38	38
2	28	27
1	99	107

-7,6,L

5	28	20
4	24	22
3	89	79
2	113	106
1	27	30

-6,6,L

5	23	23
4	13	6
3	49	46
2	183	170
1	24	21

-5,6,L

5	50	43
4	62	58
3	100	88
2	92	87
1	16	13

-4,6,L

5	44	37
4	41	40
3	25	23
2	98	93
1	76	72

-3,6,L

5	13	18
4	37	35
3	5*	3
2	240	234
1	48	40

-2,6,L

5	35	27
4	35	37
3	12	13
2	135	143
1	145	147

-1,6,L

5	44	47
4	47	46
3	19	18
2	44	45
1	66	56

0,6,L

5	60	64
4	83	84
3	73	72
2	49	51
1	30	32
0	250	232

1,6,L

5	8	7
4	19	23
3	25	27
2	76	84
1	69	70
0	105	103

2,6,L

5	55	61
4	34	33
3	39	40
2	110	113
1	62	67
0	98	95

3,6,L

4	52	58
3	24	25
2	117	122
1	16	12
0	145	138

4,6,L

4	55	61
3	17	13
2	102	110
1	59	71
0	103	104

5,6,L

4	54	58
3	17	21
2	66	70
1	41	43
0	18	24

6,6,L

4	81	85
3	78	90
2	81	97
1	28	28
0	81	75

7,6,L

4	77	74
3	26	28
2	39	43
1	52	45
0	117	115

8,6,L

3	42	37
2	41	36
1	14	12
0	15	14

9,6,L

3	45	43
2	99	87
1	90	93
0	12	5

10,6,L

3	77	75
2	109	103
1	24	23
0	41	38

11,6,L

2	9	6
1	101	102
0	47	44

12,6,L

2	26	24
1	55	54
0	44	39

13,6,L

2	64	70
1	27	27
0	16	15

14,6,L

1	28	29
0	48	45

15,6,L

0	37	38

-13,7,L

1	34	35

-12,7,L

2	14	17
1	51	57

-11,7,L

3	17	16
2	27	30
1	29	32

-10,7,L

3	51	53
2	26	30
1	49	51

-9,7,L

3	8	10
2	23	23
1	25	26

-8,7,L

3	50	51
2	28	28
1	54	59

-7,7,L

4	28	29
3	31	31
2	55	57
1	48	52

-6,7,L

4	89	88
3	61	59
2	48	44
1	55	55

-5,7,L

4	56	51
3	82	78
2	34	30
1	69	65

-4,7,L

4	26	20
3	123	126
2	28	22
1	35	35

-3,7,L

4	29	34
3	84	82

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5-BIS(2-THIENYLVINYL)THIOPHENE

Tab. 12

-3,7,L

2	39	37
1	43	39

-2,7,L

4	32	32
3	53	54
2	32	31
1	73	71

-1,7,L

4	14	16
3	101	102
2	46	44
1	45	43

0,7,L

4	18	15
3	17	19
2	31	29
1	26	24

1,7,L

4	46	49
3	32	33
2	46	45
1	144	145
0	43	40

2,7,L

4	62	62
3	63	69
2	13	13
1	33	31
0	87	89

3,7,L

4	25	24
3	74	78
2	58	59
1	25	30
0	56	54

4,7,L

4	10	9

3	39	42
2	70	77
1	107	119
0	73	73

5,7,L

3	25	29
2	53	55
1	107	120
0	18	14

6,7,L

3	59	55
2	47	50
1	56	55
0	83	75

7,7,L

3	16	15
2	36	30
1	15	15
0	21	22

8,7,L

3	21	21
2	49	47
1	134	130
0	57	58

9,7,L

2	24	27
1	34	32
0	72	72

10,7,L

2	28	28
1	32	30
0	36	35

11,7,L

0	71	78

12,7,L

1	63	60
0	12	8

13,7,L

0	30	30

-9,8,L

2	39	-
1	8*	

-8,8,L

2	4*	3
1	53	61

-7,8,L

3	37	42
2	32	40
1	39	44

-6,8,L

3	18	18
2	49	49
1	31	29

-5,8,L

3	39	35
2	70	58
1	100	104

-4,8,L

3	95	88
2	52	51
1	60	55

-3,8,L

3	21	18
2	32	32
1	68	64

-2,8,L

3	15	18
2	71	68
1	73	70

-1,8,L

3	9	6

2	20	24
1	10	9

0,8,L

3	27	24
2	14	18
1	51	53
0	130	121

1,8,L

3	8	10
2	40	36
1	10	7
0	31	33

2,8,L

3	50	51
2	69	65
1	34	31
0	26	21

3,8,L

3	41	36
2	25	24
1	9	9
0	57	53

4,8,L

2	21	23
1	46	38
0	17	17

5,8,L

2	45	40
1	64	59
0	21	22

6,8,L

2	24	26
1	26	21
0	20	19

7,8,L

2	34	33
1	14	10

0	71	63

8,8,L

1	26	27
0	56	52

9,8,L

1	17	24
0	22	17

10,8,L

0	25	23

-3,9,L

1	10*	8

-2,9,L

1	13	14

-1,9,L

1	25	23
0	39	35

0,9,L

1	33	35

1,9,L

1	9*	13

2,9,L

1	9*	9
0	29	27

3,9,L

1	9*	24
0	79	75

4,9,L

0	10*	10

Orts- und Temperaturparameter des 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzols. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung. (Die Temperaturfakt. x 100 $Å^2$).

Atom		x	y	z	U_{11} oder U	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
S	(1)	.08292(7)	.5263(-)	.1661(2)	4.1(1)	7.7(1)	5.7(1)	.3(1)	.6(1)	-.7(1)
S	(2)	.78800(7)	.3523(2)	1.0771(2)	4.9(1)	6.4(1)	5.5(1)	.6(1)	1.2(1)	-.4(1)
C	(1)	.4221(3)	.3497(7)	.4296(6)	4.8(2)	4.8(3)	3.9(2)	.1(2)	.4(2)	-1.0(2)
C	(2)	.4993(3)	.3390(6)	.5512(6)	3.8(2)	4.5(3)	4.8(2)	.7(2)	1.0(2)	.1(2)
C	(3)	.5129(3)	.4124(6)	.7621(6)	4.2(2)	3.4(2)	3.9(2)	-.2(2)	.7(2)	.6(2)
C	(4)	.4434(3)	.4965(6)	.8429(6)	4.7(2)	3.8(2)	3.9(2)	.3(2)	.8(2)	-.1(2)
C	(5)	.3666(3)	.5056(6)	.7205(6)	4.2(2)	4.1(3)	4.8(2)	.3(2)	1.4(2)	-.3(2)
C	(6)	.3532(2)	.4351(6)	.5094(6)	3.5(2)	3.5(2)	4.7(2)	-.1(2)	.6(2)	.1(2)
C	(7)	.2703(3)	.4544(6)	.3838(7)	3.9(2)	4.4(3)	5.1(2)	-.1(2)	.8(2)	-.1(2)
C	(8)	.2447(3)	.3820(7)	.1912(7)	4.0(2)	5.1(3)	5.4(2)	.1(2)	.6(2)	.3(2)
C	(9)	.1623(3)	.4073(6)	.0683(7)	4.1(2)	4.4(2)	5.0(2)	-.4(2)	.7(2)	.2(2)
C	(10)	.1383(3)	.3526(7)	-.1405(7)	4.0(2)	5.5(3)	5.4(2)	-.4(2)	.9(2)	-.7(2)
C	(11)	.0556(3)	.4070(9)	-.2192(8)	5.9(3)	7.9(4)	5.2(2)	-2.1(3)	-.3(2)	-.1(3)
C	(12)	.0180(3)	.5064(8)	-.0741(8)	3.9(2)	7.9(4)	6.6(3)	-.4(2)	-.3(2)	.5(3)
C	(13)	.5967(3)	.4031(6)	.8828(7)	3.9(2)	4.0(2)	5.2(2)	.3(2)	1.0(2)	.1(2)
C	(14)	.6225(3)	.4736(6)	1.0746(7)	4.0(2)	3.7(2)	4.6(2)	.1(2)	.8(2)	.3(2)
C	(15)	.7057(3)	.4528(5)	1.1921(7)	4.1(2)	3.7(2)	4.6(2)	-.1(2)	1.0(2)	.2(2)
C	(16)	.7290(2)	.4973(6)	1.4114(6)	3.7(2)	4.1(2)	4.2(2)	-.1(2)	.8(1)	.1(2)
C	(17)	.8155(3)	.4484(8)	1.4737(8)	5.2(3)	7.5(4)	4.9(2)	-.5(2)	-.4(2)	.6(2)
C	(18)	.8533(3)	.3726(8)	1.3119(8)	4.0(3)	7.3(3)	6.4(3)	.3(2)	.1(2)	1.2(3)
H	(1)	.416 (2)	.311 (6)	.322 (6)	4.0(12)					
H	(2)	.540 (2)	.268 (5)	.501 (6)	2.3 (8)					
H	(4)	.450 (2)	.562 (6)	.965 (6)	4.6(11)					
H	(5)	.323 (3)	.570 (7)	.781 (8)	5.6(14)					
H	(7)	.233 (3)	.567 (9)	.443 (9)	8.2(20)					
H	(8)	.281 (3)	.304 (8)	.117 (8)	6.4(15)					
H	(10)	.178 (-)	.310 (-)	-.198 (-)	5.0 (-)					
H	(11)	.032 (3)	.404 (9)	-.366 (9)	7.8(17)					
H	(12)	-.038 (3)	.579 (6)	-.088 (7)	5.0(13)					
H	(13)	.629 (2)	.353 (6)	.827 (5)	2.9 (9)					
H	(14)	.584 (3)	.552 (9)	1.162 (8)	6.8(15)					
H	(16)	.694 (-)	.587 (-)	1.513 (-)	5.0 (-)					
H	(17)	.840 (4)	.48 (1)	1.61 (1)	10.7(23)					
H	(18)	.906 (3)	.352 (8)	1.323 (7)	5.2(14)					

Tab. 13

Tab. 14 Bindungslängen und -winkel des 1,4-Bis(2-thienylvinyl)benzols. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung.

S (1) - C (9)	1,690	(4) Å	S (2) - C(15)	1,704	(4) Å
S (1) - C(12)	1,732	(5)	S (2) - C(18)	1,709	(5)
C(12) - C(11)	1,345	(8)	C(18) - C(17)	1,335	(7)
C(11) - C(10)	1,406	(6)	C(17) - C(16)	1,425	(6)
C(10) - C (9)	1,377	(6)	C(16) - C(15)	1,414	(5)
C (9) - C (8)	1,453	(6)	C(15) - C(14)	1,446	(5)
C (8) - C (7)	1,340	(6)	C(14) - C(13)	1,331	(6)
C (7) - C (6)	1,463	(5)	C(13) - C (3)	1,456	(6)
C (6) - C (5)	1,409	(6)	C (3) - C (2)	1,416	(6)
C (6) - C (1)	1,385	(6)	C (3) - C (4)	1,391	(6)
C (1) - C (2)	1,371	(5)	C (4) - C (5)	1,368	(6)
C(12) - H(12)	1,04	(4)	C(18) - H(18)	0,84	(5)
C(11) - H(11)	0,95	(5)	C(17) - H(17)	0,93	(6)
C(10) - H(10)	0,81	(5)	C(16) - H(16)	1,10	(5)
C (8) - H (8)	0,96	(5)	C(14) - H(14)	1,03	(6)
C (7) - H (7)	1,12	(6)	C(13) - H(13)	0,84	(4)
C (1) - H (1)	0,83	(4)	C (4) - H (4)	0,90	(4)
C (2) - H (2)	0,90	(3)	C (5) - H (5)	0,94	(5)
C (9) - S (1) - C(12)	92,5°	(2)	C(15) - S (2) - C(18)	91,4°	(2)
S (1) - C(12) - C(11)	111,2	(4)	S (2) - C(18) - C(17)	113,8	(4)
C(12) - C(11) - C(10)	112,1	(4)	C(18) - C(17) - C(16)	112,5	(4)
C(11) - C(10) - C (9)	113,9	(4)	C(17) - C(16) - C(15)	111,0	(4)
S (1) - C (9) - C(10)	110,2	(3)	S (2) - C(15) - C(16)	111,3	(3)
S (1) - C (9) - C (8)	122,1	(3)	S (2) - C(15) - C(14)	121,4	(3)
C (8) - C (9) - C(10)	127,5	(4)	C(14) - C(15) - C(16)	127,1	(4)
C (9) - C (8) - C (7)	126,5	(4)	C(15) - C(14) - C(13)	126,5	(4)
C (8) - C (7) - C (6)	128,0	(4)	C(14) - C(13) - C (3)	129,3	(4)
C (7) - C (6) - C (1)	122,8	(4)	C(13) - C (3) - C (4)	122,5	(4)
C (7) - C (6) - C (5)	120,6	(4)	C(13) - C (3) - C (2)	120,7	(4)
C (1) - C (6) - C (5)	116,6	(4)	C (4) - C (3) - C (2)	116,7	(4)
C (2) - C (1) - C (6)	120,7	(4)	C (5) - C (4) - C (3)	120,2	(4)
C (6) - C (5) - C (4)	123,2	(4)	C (3) - C (2) - C (1)	122,5	(4)

-15,0,L

2	33	33
3	22	20
4	141	143
5	39	35

-14,0,L

1	33	37
2	56	56
3	28	27
4	66	71
5	38	39

-13,0,L

1	408	407
2	80	84
3	9*	10
4	29	27
5	8*	8
6	40	43

-12,0,L

1	107	101
2	67	68
3	101	99
4	24	24
5	55	48
6	69	67

-11,0,L

1	173	167
2	165	168
3	189	193
4	50	49
5	9*	3
6	16	18

-10,0,L

1	26	27
2	158	151
3	99	104
4	69	66
5	41	45
6	71	72

-9,0,L

1	8*	1
2	30	30
3	51	37
4	21	22
5	9*	12
6	81	86

-8,0,L

1	204	182
2	15	13
3	300	291
4	212	211
5	62	64
6	51	53
7	33	33

-7,0,L

1	320	329
2	137	137
3	107	96
4	22	25
5	143	136
6	22	21
7	19	17

-6,0,L

1	208	211
2	112	105
3	8*	3
4	13*	3
5	273	265
6	65	61
7	8*	10

-5,0,L

1	483	461
2	267	239
3	63	68
4	86	95
5	235	225
6	143	141
7	28	27

-4,0,L

1	19	24
2	353	349
3	161	160
4	36	38
5	14	8
6	101	99
7	8*	7

-3,0,L

1	23	22
2	89	95
3	228	211
4	41	40
5	56	54
6	9*	12
7	14	11

-2,0,L

1	118	96
2	7*	6
3	177	189
4	19	28
5	9*	9
6	67	67
7	94	88

-1,0,L

1	166	168
2	178	194
3	99	99
4	210	213
5	89	91
6	70	69
7	17	18

0,0,L

1	318	338
2	34	38
3	395	399
4	110	110
5	28	28
6	31	33
7	25	23

1,0,L

0	38	32
1	581	574
2	40	30
3	81	76
4	37	52
5	106	107
6	26	26
7	24	23

2,0,L

0	149	140
1	23	18
2	317	340
3	23	21
4	108	109
5	89	83
6	18	15
7	14	13

3,0,L

0	235	240
1	143	142
2	231	252
3	160	160
4	78	73
5	36	40
6	31	34
7	8*	9

4,0,L

0	12	13
1	169	170
2	150	152
3	56	63
4	8*	5
5	146	149
6	47	45
7	64	62

5,0,L

0	83	88
1	34	33
2	358	359
3	196	193
4	48	53
5	102	103
6	49	41

6,0,L

0	145	145
1	66	65
2	182	188
3	230	230
4	273	273
5	23	17
6	9*	9

7,0,L

0	170	183
1	90	78
2	112	110
3	117	123
4	177	173
5	9*	5
6	9*	0

8,0,L

0	31	22
1	37	34
2	20	20
3	56	60
4	121	119
5	91	92
6	25	25

9,0,L

0	164	135
1	255	247
2	96	94
3	32	33
4	46	49
5	89	88
6	29	23

10,0,L

0	61	72
1	197	212
2	231	244
3	9*	5
4	9*	4
5	58	55

11,0,L

0	65	65
1	58	62
2	135	134
3	68	71
4	13	12
5	39	42

12,0,L

0	43	42
1	56	57
2	14	12
3	65	64
4	27	26
5	65	59

13,0,L

0	36	37
1	32	32
2	221	225
3	53	47
4	28	26
5	7*	4

14,0,L

0	203	198
1	21	19
2	35	33
3	18	27
4	27	28

15,0,L

0	9*	7
1	26	28
2	9*	6
3	38	38
4	29	30

-15,1,L

0	72	71
1	65	63
2	104	116
3	63	63
4	15	14
5	15	23

-14,1,L

0	121	118
1	30	29

LIST /FO/ /FC/ OF 1,4-BIS(2-THIENYLVINYL)BENZOL

Tab. 15

-14,1,L

2	82	81
3	115	114
4	67	69
5	33	34

-13,1,L

0	70	69
1	43	44
2	91	92
3	56	57
4	37	40
5	46	46

-12,1,L

0	102	108
1	56	53
2	83	78
3	107	105
4	88	89
5	33	31
6	16	23

-11,1,L

0	305	299
1	234	225
2	46	43
3	72	75
4	129	132
5	28	29
6	51	52

-10,1,L

0	49	54
1	180	170
2	116	109
3	86	92
4	75	70
5	46	46
6	32	33

-9,1,L

0	134	131
1	45	47
2	75	73
3	161	155
4	56	54
5	128	128
6	16	20

-8,1,L

0	224	208
1	227	208
2	177	183
3	196	185
4	48	50
5	24	30
6	150	148
7	33	36

-7,1,L

0	40	40
1	128	136
2	520	488
3	218	212
4	91	91
5	127	118
6	50	49
7	24	24

-6,1,L

0	153	141
1	139	143
2	264	258
3	66	53
4	27	31
5	100	102
6	62	59
7	31	27

-5,1,L

0	185	181
1	367	344
2	191	184
3	168	176
4	176	186
5	78	79
6	55	56
7	30	25

-4,1,L

0	383	389
1	43	53
2	213	195
3	125	117
4	19	13
5	41	42
6	48	47
7	31	31

-3,1,L

0	532	515
1	126	142
2	175	178
3	173	167
4	164	166
5	97	94
6	39	40
7	34	36

-2,1,L

0	186	182
1	946	984
2	95	98
3	45	47
4	117	93
5	169	176
6	56	60
7	20	22

-1,1,L

0	103	113
1	349	381
2	324	333
3	93	91
4	91	91
5	110	111
6	112	111
7	23	23

0,1,L

0	6*	0
1	239	239
2	31	50
3	293	289
4	140	146
5	62	63
6	62	62
7	40	35

1,1,L

0	104	113
1	306	301
2	72	70
3	139	136
4	97	105
5	94	100
6	29	27
7	59	55

2,1,L

0	187	182
1	112	123
2	286	310
3	342	342
4	121	128
5	30	29
6	24	30
7	18	14

3,1,L

0	533	513
1	50	54
2	106	105
3	265	266
4	175	176
5	45	47
6	69	70
7	22	19

4,1,L

0	382	389
1	159	160
2	305	302
3	106	111
4	26	26
5	104	111
6	19	17
7	54	56

5,1,L

0	186	181
1	98	104
2	174	169
3	144	146
4	51	50
5	202	202
6	38	37

6,1,L

0	151	141
1	493	492
2	198	210
3	38	37
4	232	236
5	62	64
6	35	31

7,1,L

0	40	40
1	167	152
2	262	277
3	69	76
4	105	116
5	35	34
6	30	29

8,1,L

0	228	208
1	94	96
2	72	75
3	140	145
4	34	36
5	60	63
6	53	45

9,1,L

0	137	131
1	174	174
2	140	142
3	46	46
4	56	60
5	34	34
6	24	24

10,1,L

0	48	54
1	72	73
2	157	158
3	21	24
4	31	27
5	38	34

11,1,L

0	303	299
1	69	69
2	68	65
3	138	139
4	74	71
5	33	32

12,1,L

0	101	108
1	108	109
2	48	46
3	28	33
4	91	80
5	76	73

13,1,L

0	68	69
1	177	174
2	137	139
3	26	26
4	39	40

14,1,L

0	120	118
1	114	110
2	40	32
3	41	40
4	45	46

15,1,L

0	69	71
1	64	68
2	15	13
3	34	35
4	15	16

-15,2,L

0	19	19
1	32	26
2	123	123
3	28	28
4	72	74
5	7*	5

LIST /FO/ /FC/ OF 1,4-BIS(2-THIENYLVINYL)BENZOL

Tab. 15

-14,2,L

1	22	24
2	75	77
3	33	31
4	47	48
5	14	13

-13,2,L

0	68	66
1	257	257
2	78	81
3	134	138
4	74	71
5	23	22

-12,2,L

0	59	62
1	92	93
2	45	46
3	99	98
4	63	68
5	25	19
6	45	49

-11,2,L

0	279	278
1	128	129
2	58	54
3	98	99
4	34	39
5	33	38
6	12	10

-10,2,L

0	17	16
1	25	28
2	120	113
3	38	38
4	118	119
5	96	97
6	68	73

-9,2,L

0	161	141
1	154	164
2	186	197
3	62	55
4	31	35
5	22	23
6	68	68

-8,2,L

0	78	78
1	171	158
2	90	96
3	193	183
4	112	109
5	55	53
6	88	88

-7,2,L

0	66	67
1	141	140
2	101	106
3	82	73
4	45	46
5	102	97
6	77	76
7	65	64

-6,2,L

0	170	159
1	112	106
2	157	157
3	200	208
4	59	59
5	178	174
6	35	33
7	28	30

-5,2,L

0	231	239
1	291	270
2	163	148
3	75	77
4	156	154
5	143	136
6	67	64
7	17	12

-4,2,L

0	102	117
1	98	79
2	97	77
3	74	77
4	188	190
5	78	80
6	56	55
7	43	44

-3,2,L

0	464	468
1	194	188
2	112	116
3	146	146
4	167	168
5	159	163
6	42	42
7	21	20

-2,2,L

0	237	245
1	934	950
2	189	195
3	73	68
4	124	128
5	89	90
6	31	29
7	53	47

-1,2,L

0	139	150
1	48	39
2	250	233
3	51	53
4	82	72
5	49	53
6	43	42
7	35	36

0,2,L

0	936E1	256
1	139	147
2	114	130
3	225	206
4	44	42
5	70	71
6	81	82
7	46	46

1,2,L

0	142	150
1	260	249
2	82	87
3	201	209
4	84	87
5	87	86
6	13	15
7	14	14

2,2,L

0	235	245
1	80	68
2	321	314
3	110	113
4	53	53
5	27	17
6	44	44
7	41	39

3,2,L

0	470	467
1	43	39
2	93	95
3	162	164
4	126	129
5	43	42
6	62	62
7	41	34

4,2,L

0	103	117
1	171	183
2	81	76
3	112	113
4	111	113
5	134	129
6	22	18

5,2,L

0	236	239
1	132	149
2	280	274
3	109	103
4	41	45
5	87	89
6	22	20

6,2,L

0	175	159
1	42	42
2	91	89
3	111	106
4	168	169
5	53	53
6	61	62

7,2,L

0	65	67
1	80	77
2	182	185
3	77	77
4	144	141
5	38	39
6	51	50

8,2,L

0	77	78
1	104	111
2	187	203
3	223	237
4	71	69
5	43	36
6	48	44

9,2,L

0	160	141
1	117	110
2	96	100
3	32	28
4	19	14
5	48	45
6	42	39

10,2,L

0	19	16
1	114	119
2	107	103
3	61	61
4	79	80
5	34	31

11,2,L

0	278	278
1	71	73
2	118	116
3	121	127
4	64	62
5	27	27

12,2,L

0	59	62
1	166	168
2	27	25
3	14	13
4	34	34
5	33	31

13,2,L

0	65	66
1	41	40
2	132	133
3	9*	7
4	35	36

14,2,L

0	110	109
1	30	32
2	51	46
3	21	17
4	46	42

15,2,L

0	19	19
1	123	126
2	59	55
3	28	24

-15,3,L

0	118	117
1	59	55
2	98	105
3	20	25
4	7*	9

-14,3,L

0	70	74

LIST /FO/ /FC/ OF 1,4-BIS(2-THIENYLVINYL)BENZOL

Tab. 15

-14,3,L

1	18	20
2	35	39
3	8*	10
4	73	74
5	55	59

-13,3,L

0	42	40
1	45	44
2	106	106
3	66	66
4	37	36
5	67	67

-12,3,L

0	54	52
1	51	48
2	117	116
3	61	61
4	14	14
5	18	19

-11,3,L

0	129	134
1	67	69
2	41	41
3	17	22
4	21	25
5	27	30
6	89	96

-10,3,L

0	48	47
1	44	45
2	133	125
3	137	139
4	82	78
5	20	17
6	32	36

-9,3,L

0	172	171
1	37	34
2	80	82
3	256	248
4	78	77
5	25	30
6	36	37

-8,3,L

0	284	268
1	100	101
2	19	15
4	50	47
5	66	64
6	45	49

-7,3,L

0	35	34
1	68	69
2	73	67
3	53	48
4	127	128
5	47	46
6	50	49

-6,3,L

0	191	173
1	207	210
2	247	243
3	85	84
4	45	45
5	111	109
6	60	58

-5,3,L

0	100	105
1	511	487
2	234	229
3	57	55
4	134	130
5	13	12
6	27	22

-4,3,L

0	87	87
1	155	151
2	353	330
3	30	27
4	117	113
5	9*	7
6	73	70
7	47	45

-3,3,L

0	149	142
1	98	87
2	266	276
3	216	229
4	125	128
5	74	73
6	62	58
7	45	42

-2,3,L

0	149	149
1	513	484
2	132	130
4	122	121
5	25	28
6	9*	16
7	30	28

-1,3,L

0	130	145
1	99	100
2	96	88
3	129	130
4	107	107
5	16	18
6	11*	19
7	34	35

0,3,L

0	8*	0
1	29	23
2	72	66
3	118	123
4	207	216
5	90	89
6	32	34
7	22	17

1,3,L

0	130	145
1	274	273
2	37	43
3	46	48
4	160	164
5	153	156
6	26	23

2,3,L

0	148	149
1	165	173
2	254	243
3	37	39
4	26	27
5	41	43
6	69	71

3,3,L

0	146	142
1	67	68
2	128	128
3	112	103
4	45	49
5	54	54
6	117	111

4,3,L

0	88	87
1	145	163
3	147	155
4	33	32
5	105	105
6	25	27

5,3,L

0	100	105
1	37	40
2	53	58
3	194	193
4	25	31
5	78	75
6	8*	11

6,3,L

0	190	173
1	13	15
2	16	16
3	16	18
4	71	72
5	18	18
6	50	55

7,3,L

0	32	34
1	192	183
2	41	42
3	69	72
4	107	112
5	38	32
6	10*	14

8,3,L

0	279	268
1	137	142
2	33	35
3	187	192
4	45	49
5	19	14
6	20	11

9,3,L

0	173	171
1	266	267
2	75	78
3	132	134
4	77	80
5	43	41

10,3,L

0	48	47
1	123	125
2	97	99
3	54	56
4	56	57

11,3,L

0	129	134
1	92	93
2	73	74
3	80	80
4	24	22
5	31	28

12,3,L

0	54	52
1	120	119
2	61	61
3	9*	5
4	16	10

13,3,L

0	39	40
1	41	38
2	62	60
3	37	39
4	29	31

14,3,L

0	71	74
1	14	9
2	23	18
3	68	64

15,3,L

0	115	117
1	108	113
2	24	23
3	24	21

-15,4,L

0	23	21
1	32	33
2	88	89
3	36	39
4	35	33

-14,4,L

0	57	58
1	77	77
2	98	101
3	40	35
4	64	66

-13,4,L

0	56	53
1	23	22
2	59	61

LIST /FO/ /FC/ OF 1,4-BIS(2-THIENYLVINYL)BENZOL

Tab. 15

-13,4,L

3	99	101
4	49	41
5	25	27

-12,4,L

0	31	34
1	18	14
2	9*	11
3	48	47
4	35	32
5	52	54

-11,4,L

0	236	228
1	43	45
2	101	102
3	26	27
4	11*	17
5	24	24

-10,4,L

0	65	63
1	52	53
2	83	81
3	46	44
4	94	93
5	86	86

-9,4,L

0	130	126
1	98	100
2	134	143
3	44	44
4	47	45
5	27	30
6	35	35

-8,4,L

0	44	40
1	79	81
2	51	52
3	39	40
4	40	38
5	73	76
6	79	84

-7,4,L

0	87	89
1	91	94
2	51	55
3	27	26
4	62	62
5	34	34
6	49	49

-6,4,L

0	141	134
1	25	24
2	96	98
3	105	107
4	44	40
5	11*	16
6	16	17

-5,4,L

0	138	135
1	122	123
2	8*	11
3	64	60
4	150	142
5	12*	16
6	52	50

-4,4,L

0	52	56
1	154	155
2	364	355
3	30	27
4	165	165
5	93	94
6	8*	8

-3,4,L

0	304	293
1	162	161
2	10*	9
3	126	127
4	134	137
5	99	98
6	33	34

-2,4,L

0	137	138
1	561	534
2	142	148
3	98	97
4	92	91
5	66	69
6	32	29

-1,4,L

0	107	103
1	127	126
2	123	115
3	121	122
4	136	136
5	27	24
6	18	10

0,4,L

0	67	81
1	100	101
2	54	59
3	36	40
4	65	66
5	51	49
6	50	51

1,4,L

0	108	103
1	138	136
2	57	55
3	100	95
4	82	80
5	43	47
6	26	27

2,4,L

0	137	138
1	129	133
2	127	113
3	76	77
4	41	39
5	71	73
6	54	56

3,4,L

0	308	293
1	96	106
2	88	87
3	142	150
4	107	108
5	17	19
6	66	66

4,4,L

0	55	56
1	188	186
2	20	20
3	68	68
4	60	59
5	67	65
6	30	30

5,4,L

0	138	135
1	66	75
2	120	111
3	90	94
4	41	42
5	59	59
6	28	26

6,4,L

0	142	134
1	20	22
2	38	43
3	69	69
4	39	40
5	34	35
6	47	43

7,4,L

0	89	89
1	74	74
2	101	103
3	19	14
4	75	77
5	11*	12

8,4,L

0	43	40
1	63	70
2	161	171
3	188	195
4	12*	12
5	36	38

9,4,L

0	128	126
1	158	163
2	48	51
3	21	22
4	69	72
5	20	18

10,4,L

0	65	63
1	18	19
2	131	129
3	37	39
4	50	48
5	25	23

11,4,L

0	228	228
1	96	96
2	78	76
3	89	87
4	42	40

12,4,L

0	32	34
1	107	107
2	56	52
3	55	52
4	19	20

13,4,L

0	56	53
1	51	51
2	42	41
3	51	48

14,4,L

0	53	58
1	13	15
2	18	14
3	14	16

15,4,L

0	20	21
1	98	99
2	34	29

-15,5,L

0	54	51
1	9*	7
2	68	71
3	37	42

-14,5,L

0	52	50
1	25	29
2	45	43
3	54	51

-13,5,L

0	65	63
1	11*	4
2	37	41
3	25	26
4	7*	14

-12,5,L

0	9*	14
1	34	34
2	26	27
3	65	67
4	62	66

-11,5,L

0	46	47
1	46	41
2	60	60
3	28	31
4	84	88
5	35	37

-10,5,L

0	73	71
1	111	111
2	62	61

LIST /FO/ /FC/ OF 1,4-BIS(2-THIENYLVINYL)BENZOL

Tab. 15

-10,5,L

3	41	41
4	34	44
5	36	34

-9,5,L

0	74	76
1	31	29
2	12*	16
3	84	86
4	20	22
5	59	60

-8,5,L

0	71	67
1	73	73
2	108	106
3	83	81
4	26	23
5	50	51

-7,5,L

0	45	42
1	61	64
2	175	173
3	66	67
4	35	32
5	22	17

-6,5,L

0	95	96
1	56	67
2	75	72
3	148	143
4	54	52
5	9*	11
6	25	30

-5,5,L

0	37	37
1	188	183
2	77	74
3	139	140
4	49	50
5	31	24
6	39	41

-4,5,L

0	89	81
1	172	167
2	201	188
3	66	63
4	116	112
5	39	38
6	12	12

-3,5,L

0	221	217
1	152	149
2	132	135
3	146	145
4	38	38
5	21	26
6	22	16

-2,5,L

0	9*	12
1	134	119
2	41	40
3	63	61
4	77	78
5	52	56
6	50	46

-1,5,L

0	12*	7

-2,5,L

6	50	46

-1,5,L

0	12*	7
1	73	78
2	130	136
3	111	112
4	64	63
5	65	65
6	38	38

0,5,L

0	10*	0
1	73	76
2	93	91
3	20	21
4	69	68
5	11*	8
6	10*	9

1,5,L

0	12*	7
1	70	69
2	56	53
3	90	88
4	77	77
5	66	69
6	40	39

2,5,L

0	12*	12
1	36	45
2	110	103
3	162	165
4	82	84
5	38	39
6	65	67

3,5,L

0	220	217
1	48	53
2	34	37
3	16	16
4	124	124
5	11*	19
6	58	57

4,5,L

0	89	81
1	163	163
2	103	96
3	35	37
4	22	23
5	26	24

5,5,L

0	38	37
1	17	21
2	38	33
3	43	38
4	41	42
5	54	49

6,5,L

0	97	96
1	153	159
2	83	84
3	31	34
4	54	60
5	11*	12

7,5,L

0	45	42
1	155	157
2	129	130
3	23	22
4	11*	14
5	34	34

8,5,L

0	69	67
1	39	38
2	57	58
3	81	82
4	11*	9
5	36	37

9,5,L

0	72	76
1	146	148
2	59	61
3	127	126
4	44	46

10,5,L

0	72	71
1	96	91
2	116	113
3	65	60
4	34	31

11,5,L

0	47	47
1	43	44
2	18	18
3	30	29
4	10*	7

12,5,L

0	11*	14
1	77	79
2	25	26
3	22	22

13,5,L

0	65	63
1	39	38
2	31	34
3	16	19

14,5,L

0	51	50
1	39	37
2	9*	9

15,5,L

0	52	51
1	53	57

-14,6,L

0	63	64
1	55	55
2	45	46

-13,6,L

0	40	40
1	46	47
2	25	24
3	9*	5

-12,6,L

0	54	54
1	51	54
2	37	34
3	46	46

-11,6,L

0	53	53
1	13	14
2	95	99
3	40	41
4	9*	14

-10,6,L

0	34	31
1	20	25
2	32	31
3	35	28
4	21	27

-9,6,L

0	72	70
1	30	30
2	22	21
3	11*	12
4	24	24

-8,6,L

0	19	18
1	44	44
2	12*	14
3	16	13
4	62	58
5	40	40

-7,6,L

0	74	72
1	99	98
2	39	38
3	22	20
4	24	26
5	31	33

-6,6,L

0	86	87
1	33	28
2	45	43
3	80	80
4	71	73
5	47	49

-5,6,L

0	35	34

LIST /FO/ /FC/ OF 1,4-BIS(2-THIENYLVINYL)BENZOL

Tab. 15

-5,6,L		
1	93	85
2	41	40
3	17	7
4	64	60
5	28	30

-4,6,L		
0	29	25
1	104	102
2	264	258
3	11*	10
4	40	42
5	49	50

-3,6,L		
0	104	105
1	35	33
2	73	69
3	121	116
4	25	27
5	31	30

-2,6,L		
0	33	37
1	88	81
2	41	39
3	102	99
4	47	44
5	10*	13

-1,6,L		
0	87	91
1	88	81
2	79	78
3	102	107
4	103	100
5	29	27

0,6,L		
0	133	157
1	109	111
2	46	45
3	21	22
4	65	65
5	10*	8

1,6,L		
0	86	91
1	127	122
2	63	62
3	51	51
4	71	69
5	18	10

2,6,L		
0	36	37
1	82	86
2	11*	14
3	11*	7
4	30	32
5	50	52

3,6,L		
0	101	105
1	76	79
2	57	55
3	77	78
4	39	45
5	19	17

4,6,L		
0	21	25
1	91	90
2	27	26
3	9*	10
4	39	41
5	10*	6

5,6,L		
0	34	34
1	33	37
2	21	18
3	80	82
4	23	21
5	32	35

6,6,L		
0	87	87
1	12*	12
2	48	49
3	83	85
4	44	49

7,6,L		
0	73	72
1	63	64
2	69	76
3	40	38
4	22	23

8,6,L		
0	23	18
1	12*	12
2	51	55
3	52	54
4	15	8

9,6,L		
0	72	70
1	145	145
2	25	23
3	16	17
4	51	52

10,6,L		
0	35	31
1	40	44
2	138	135
3	17	15

11,6,L		
0	50	53
1	57	59
2	40	37
3	20	19

12,6,L		
0	55	54
1	50	47
2	30	30

13,6,L		
0	40	40
1	48	46
2	43	44

14,6,L		
0	62	64
1	25	25

-12,7,L		
0	9*	7
1	37	38

-11,7,L		
0	13	14
1	28	25
2	27	28

-10,7,L		
0	35	35
1	45	47
2	25	29
3	32	31

-9,7,L		
0	27	29
1	54	53
2	29	27
3	38	37

-8,7,L		
0	42	38
1	36	33
2	48	51
3	25	28
4	61	63

-7,7,L		
0	9*	9
1	28	30
2	104	109
3	34	32
4	54	56

-6,7,L		
0	70	64
1	36	33
2	43	40
3	85	90
4	34	31

-5,7,L		
0	20	22
1	28	24
2	29	26
3	87	94
4	8*	8

-4,7,L		
0	55	51
1	61	60
2	56	53
3	67	63
4	27	20

-3,7,L		
0	90	96
1	68	64
2	30	24
3	53	51
4	11*	5

-2,7,L		
0	63	63
1	17	22
2	56	48
3	77	76
4	31	30

-1,7,L		
0	63	68
1	30	31
2	96	94
3	43	42
4	17	15

0,7,L		
0	11*	0
1	27	29
2	21	19
3	28	31
4	22	21

1,7,L		
0	66	68
1	101	105
2	69	68
3	58	59
4	11*	13

2,7,L		
0	64	63
1	43	40
2	11*	6
3	81	85
4	35	34

3,7,L		
0	93	96
1	23	22
2	19	21
3	28	25
4	66	69

4,7,L		
0	54	51
1	97	96
2	49	45
3	34	34
4	10*	11

5,7,L		
0	23	22
1	9*	9
2	64	65
3	65	67
4	20	23

6,7,L		
0	68	64
1	79	78
2	39	34
3	48	51

7,7,L		
0	12*	9
1	58	60

LIST /F /FC/ OF 1,4-BIS(2-THIENYLVINYL)BENZOI

Tab. 15

7,7,L

2	80	82
3	21	18

8,7,L

0	43	38
1	31	29
2	53	51
3	24	25

9,7,L

0	30	29
1	53	53
2	24	28

10,7,L

0	36	35
1	40	43
2	62	63

11,7,L

0	17	14

10,7,L

2	62	63

11,7,L

0	17	14
1	48	44

12,7,L

0	7*	7

-9,8,L

0	31	26
1	50	50

-8,8,L

0	11*	10
1	23	25
2	19	17

-7,8,L

0	16	15
1	35	36
2	19	28

-6,8,L

0	33	36
1	12*	17
3	84	91

-5,8,L

0	53	46
1	44	44
2	13*	12

-4,8,L

0	28	29
1	24	18
2	77	82

-3,8,L

0	23	19
1	22	22
2	56	56
3	44	47

-2,8,L

0	56	59
1	61	56

-1,8,L

0	31	31
1	46	46
2	100	97

0,8,L

1	51	45
2	56	57

1,8,L

1	50	52
2	56	58

Orts- und Temperaturparameter des 2,5-Distyrylthiophens. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung. (Die Temperaturfakt. x 100 $Å^2$).

Atom		x	y	z	U_{11} oder U	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
S	(1)	.41690(3))	.3774(2)	.0157(2)	5.1(1)	5.9(1)	4.1(1)	-.2(1)	-.3(1)	-.6(1)
C	(1)	.3808(1)	.4272(6)	.2160(9)	5.2(2)	4.8(3)	4.8(3)	.2(2)	.0(2)	.2(2)
C	(2)	.3963(1)	.5065(7)	.409 (1)	6.1(3)	6.4(3)	4.3(3)	.2(3)	-.3(2)	-.6(3)
C	(3)	.4367(1)	.5295(7)	.393 (1)	6.1(3)	5.6(3)	4.6(3)	-.3(2)	-1.1(3)	-.4(3)
C	(4)	.4527(1)	.4688(6)	.1888(9)	5.4(2)	4.7(2)	5.1(3)	-.4(2)	-.7(2)	.2(3)
C	(5)	.4929(1)	.4805(7)	.1184(9)	5.3(3)	5.6(3)	4.8(3)	-.3(2)	-1.2(2)	.0(3)
C	(6)	.5077(1)	.4285(7)	-.0826(9)	5.6(3)	5.1(3)	4.3(3)	-.4(2)	-1.0(2)	.0(2)
C	(7)	.5485(1)	.4405(6)	-.1546(9)	5.4(2)	4.5(2)	4.1(3)	.2(2)	-.9(2)	.4(2)
C	(8)	.5769(1)	.5228(7)	-.023 (1)	5.6(3)	5.4(3)	5.5(3)	-.4(2)	-.1(3)	-.5(3)
C	(9)	.6152(1)	.5214(7)	-.088 (1)	5.6(3)	6.3(3)	6.1(4)	-.7(3)	-.6(3)	-.3(3)
C	(10)	.6263(1)	.4417(8)	-.292 (1)	5.9(3)	6.1(3)	6.9(4)	.0(3)	.3(3)	.7(3)
C	(11)	.5986(2)	.3622(8)	-.427 (1)	8.1(3)	6.0(3)	4.9(3)	.5(3)	.5(3)	-.1(3)
C	(12)	.5601(1)	.3642(7)	-.3597(9)	6.9(3)	5.3(3)	4.5(3)	-.6(3)	-.3(3)	-.1(3)
C	(13)	.3401(1)	.3900(7)	-.8280(9)	5.4(2)	5.2(3)	4.8(3)	.7(2)	.2(2)	-.0(3)
C	(14)	.3249(1)	.3270(6)	-.0205(9)	5.1(2)	5.3(3)	4.6(3)	.7(2)	-.0(2)	-.3(3)
C	(15)	.2838(1)	.2886(6)	-.0631(8)	5.2(2)	4.8(2)	3.3(3)	.5(2)	-.5(2)	.4(2)
C	(16)	.2731(1)	.2039(7)	-.2656(9)	6.1(3)	5.9(3)	4.4(3)	.4(3)	-.1(2)	.2(3)
C	(17)	.2346(1)	.1611(7)	-.313 (1)	6.3(3)	5.8(3)	6.5(3)	-.6(3)	-1.2(3)	-.1(3)
C	(18)	.2063(1)	.2066(8)	-.152 (1)	4.9(2)	7.1(3)	7.0(4)	-.8(3)	-1.0(3)	1.3(3)
C	(19)	.2164(1)	.2916(8)	.049 (1)	4.9(2)	7.4(3)	5.5(3)	.0(2)	.3(2)	.6(3)
C	(20)	.2546(1)	.3335(7)	.094 (1)	5.6(3)	5.5(3)	4.6(3)	.3(2)	.1(2)	.0(3)
H	(2)	.381 (1)	.530 (7)	.569 (9)	6.0(0)					
H	(3)	.451 (1)	.586 (6)	.524 (9)	6.0(0)					
H	(5)	.509 (1)	.518 (7)	.24 (1)	6.0(0)					
H	(6)	.491 (1)	.370 (7)	-.208 (9)	6.0(0)					
H	(8)	.569 (1)	.583 (7)	.093 (9)	6.0(0)					
H	(9)	.635 (1)	.573 (7)	-.016 (9)	6.0(0)					
H	(10)	.652 (1)	.439 (7)	-.32 (1)	6.0(0)					
H	(11)	.605 (1)	.311 (7)	-.590 (9)	6.0(0)					
H	(12)	.541 (1)	.298 (6)	-.438 (9)	6.0(0)					
H	(13)	.324 (1)	.431 (7)	.290 (9)	6.0(0)					
H	(14)	.341 (1)	.299 (7)	-.148 (9)	6.0(0)					
H	(16)	.294 (1)	.171 (6)	-.385 (9)	6.0(0)					
H	(17)	.227 (1)	.105 (7)	-.502 (9)	6.0(0)					
H	(18)	.182 (1)	.180 (7)	-.16 (1)	6.0(0)					
H	(19)	.196 (1)	.324 (7)	.175 (9)	6.0(0)					

Tab. 16

Tab. 17

Bindungslängen und -winkel des 2,5-Distyrylthiophens. In Klammern die auf die letzte angegebene Stelle bezogene Standardabweichung.

C (2) - C (3)	1,413 (7) Å		S (1) - C (4)	1,736 (5) Å	
S (1) - C (1)	1,740 (5)		C (4) - C (3)	1,378 (7)	
C (1) - C (2)	1,375 (7)		C (4) - C (5)	1,452 (7)	
C (1) - C(13)	1,460 (7)		C (5) - C (6)	1,323 (7)	
C(13) - C(14)	1,316 (7)		C (6) - C (7)	1,475 (6)	
C(14) - C(15)	1,472 (6)		C (7) - C(12)	1,376 (7)	
C(15) - C(16)	1,383 (7)		C(12) - C(11)	1,386 (8)	
C(16) - C(17)	1,399 (7)		C(11) - C(10)	1,375 (8)	
C(17) - C(18)	1,390 (8)		C(10) - C (9)	1,378 (9)	
C(18) - C(19)	1,373 (8)		C (9) - C (8)	1,376 (7)	
C(19) - C(20)	1,385 (7)		C (8) - C (7)	1,391 (7)	
C(20) - C(15)	1,395 (7)				
C (2) - H (2)	1,08 (5)		C (3) - H (3)	1,00 (5)	
C(13) - H(13)	0,92 (5)		C (5) - H (5)	0,93 (5)	
C(14) - H(14)	0,94 (5)		C (6) - H (6)	1,02 (5)	
C(16) - H(16)	1,01 (5)		C(12) - H(12)	0,95 (5)	
C(17) - H(17)	1,20 (5)		C(11) - H(11)	1,04 (5)	
C(18) - H(18)	0,87 (5)		C(10) - H(10)	0,90 (4)	
C(19) - H(19)	1,04 (5)		C (9) - H (9)	0,91 (5)	
C(20) - H(20)	1,00 (6)		C (8) - H (8)	0,86 (5)	
C (1) - S (1) - C (4)	92,5° (2)				
S (1) - C (1) - C (2)	110,7 (4)		S (1) - C (4) - C (3)	109,8° (4)	
S (1) - C (1) - C(13)	122,4 (4)		S (1) - C (4) - C (5)	123,3 (4)	
C (1) - C (2) - C (3)	112,8 (5)		C (4) - C (3) - C (2)	114,2 (5)	
C (1) - C(13) - C(14)	127,1 (5)		C (4) - C (5) - C (6)	126,5 (5)	
C(13) - C(14) - C(15)	126,8 (4)		C (5) - C (6) - C (7)	126,5 (5)	
C(14) - C(15) - C(16)	119,5 (4)		C (6) - C (7) - C(12)	119,5 (4)	
C(14) - C(15) - C(20)	122,8 (4)		C (6) - C (7) - C (8)	123,5 (4)	
C(15) - C(16) - C(17)	121,8 (5)		C (7) - C(12) - C(11)	121,6 (5)	
C(16) - C(17) - C(18)	119,0 (5)		C(12) - C(11) - C(10)	120,5 (5)	
C(17) - C(18) - C(19)	119,9 (5)		C(11) - C(10) - C (9)	118,8 (5)	
C(18) - C(19) - C(20)	120,5 (5)		C(10) - C (9) - C (8)	120,3 (5)	
C(19) - C(20) - C(15)	121,1 (5)		C (9) - C (8) - C (7)	121,8 (5)	
C(13) - C (1) - C (2)	127,0 (5)		C (5) - C (4) - C (3)	126,9 (5)	
C(16) - C(15) - C(20)	117,7 (4)		C(12) - C (7) - C (8)	116,9 (4)	

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5 - DISTYRYL - THIOPHENE

Tab. 18

H,0,0

2	207	223
4	11*	17
6	956	1092
8	12*	12
10	325	350
12	231	241
14	327	340
16	79	78
18	453	426
20	79	81
22	87	88
24	368	367
26	77	76
28	55	52
30	220	213
32	68	67
34	37	36
36	65	50
38	68	59

H,1,0

1	243	236
2	253	268
3	162	186
4	123	136
5	29	32
6	220	233
7	113	120
8	16	19
9	264	277
10	357	378
11	262	274
12	55	50
13	334	344
14	473	480
15	125	126
16	43	49
17	68	65
18	160	152
19	97	91
20	175	169
21	26	30
22	297	301
23	96	100
24	52	49
25	108	107
26	84	86
27	35	39
28	193	184
29	87	82
30	11*	4
31	74	76
32	85	83
33	36	27
34	99	95
35	46	41
36	16	15
37	59	56
38	68	63

H,2,0

0	621	616
1	1159	1157
2	1299	1301
3	261	260
4	661	685
5	203	205
6	11*	1
7	225	221
8	241	252
9	18	10
10	41	46
11	284	285
12	54	55
13	326	335
14	115	103
15	162	158
16	461	458
17	61	55
18	144	142
19	81	91
20	123	119
21	95	92
22	15	14
23	208	211
24	49	48
25	255	258
26	166	166
27	145	141
28	78	72
29	107	105
30	14*	21
31	145	144
32	45	45
33	50	53
34	22	26
35	41	40
36	11*	5
37	66	59

H,3,0

1	183	176
2	272	266
3	11*	14
4	28	27
5	264	247
6	167	161
7	52	48
8	194	190
9	145	143
10	277	270
11	222	221
12	137	130
13	187	187
14	181	179
15	203	206
16	222	218
17	213	214
18	71	71
19	36	38
20	84	88
21	273	271
22	223	230
23	331	325
24	176	174
25	128	131
26	141	139
27	79	77
28	117	116
29	190	191
30	40	42
31	126	130
32	112	110
33	65	61
34	81	77
35	98	102
36	11*	11

H,4,0

0	146	141
1	158	139
2	11*	18
3	187	169
4	188	170
5	55	57
6	197	199
7	287	275
8	123	120
9	122	116
10	102	96
11	155	149
12	446	442
13	60	57
14	36	31
15	59	60
16	92	95
17	60	53
18	257	261
19	81	83
20	50	41
21	72	71
22	59	58
23	139	146
24	110	115
25	78	81
26	18	22
27	26	26
28	126	132
29	151	168
30	40	44
31	36	42
32	22	13
33	37	36
34	53	60

H,5,0

1	67	66
2	71	73
3	119	116
4	20	15
5	67	59
6	24	22
7	164	155
8	57	48
9	147	144
10	166	160
11	110	97
12	10*	6
13	65	68
14	65	68
15	148	152
16	124	126
17	80	80
18	11*	13
19	64	67
20	72	70
21	156	163
22	89	93
23	175	186
24	38	37
25	72	73
26	86	95
27	171	185
28	11*	5
29	28	33
30	11*	15
31	22	23

H,6,0

0	145	143
1	152	149
2	70	68
3	55	58
4	67	63
5	285	269
6	132	127
7	247	235
8	27	25
9	21	23
10	11*	4
11	166	156
12	105	104
13	251	249
14	73	74
15	71	70
16	25	28
17	76	78
18	11*	10
19	121	131
20	11*	13
21	49	56
22	11*	12
23	36	43
24	51	55
25	25	25
26	39	37
27	25	22
28	51	60

H,7,0

1	16	18
2	78	72
3	68	64
4	59	50
5	49	45
6	29	27
7	33	39
8	68	67
9	11*	9
10	64	63
11	38	39
12	54	50
13	73	67
14	57	59
15	42	41
16	75	77
17	60	54
18	30	30
19	43	51
20	30	34
21	16	14
22	34	40

H,8,0

0	22	21
1	14*	16
2	99	92
3	42	36
4	102	93
5	53	53
6	103	99
7	11*	1
8	69	67
9	11*	12
10	55	48
11	40	39
12	132	130
13	13*	4
14	31	33

H,0,1

1	39	69
2	214E	346
3	39	45
4	34	41
5	59	70
6	48	46
7	48	55
8	83	88
9	104	105
10	404	420
11	191	205
12	27	32
13	77	74
14	544	572
15	114	122
16	20	21
17	17	12

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5 - DISTYRYL - THIOPHENE

Tab. 18

H,0,1		
18	30	35
19	12*	21
20	349	356
21	54	54
22	168	174
23	133	136
24	78	78
25	167	169
26	205	211
27	64	54
28	59	60
29	76	71
30	37	42
31	58	60
32	129	127
33	19	23
34	50	45
35	10*	10
36	10*	5
37	13*	2
38	71	69
H,1,1		
0	872	877
1	677	674
2	980	994
3	649	646
4	625	633
5	167	161
6	122	118
7	86	83
8	294	305
9	145	143
10	266	268
11	398	425
12	218	229
13	365	377
14	326	319
15	244	239
16	289	277
17	124	128
18	95	100
19	187	190
20	207	200
21	119	103
22	79	74
23	278	278
24	306	305
25	343	337
26	157	152
27	80	78
28	107	110
29	132	131
30	198	[illegible]
31	210	[illegible]
32	29	23
33	[illegible]	[illegible]

36	77	[illegible]
37	69	67
H,2,1		
0	315	[illegible]
1	919	[illegible]
2	777	75[illegible]
3	559	55[illegible]
4	416	40[illegible]
5	372	[illegible]
6	124	123
7	409	401
8	254	245
9	412	417
10	15[illegible]	[illegible]
11	333	[illegible]
12	97	91
13	246	234
14	102	[illegible]
15	233	242
16	207	201
17	91	93
18	119	125
19	123	130
20	7[illegible]	76
21	204	20[illegible]
22	65	67
23	137	136
24	76	[illegible]
25	137	136
26	143	143
27	86	85
28	34	37
29	74	73
30	56	50
31	111	117
32	36	33
33	91	84
34	27	24
35	58	52
36	14	17
37	34	37
H,3,1		
0	185	175
1	458	455
2	545	533
3	35[illegible]	[illegible]
4	45	39
5	39	41
6	94	90
7	178	179
8	45	54
9	212	203
10	196	[illegible]
11	[illegible]	[illegible]
12	[illegible]	[illegible]
[illegible]	[illegible]	[illegible]

16	67	60
17	165	[illegible]
18	11[illegible]	120
19	160	[illegible]
20	77	72
21	66	66
22	117	116
23	7[illegible]	7[illegible]
24	140	[illegible]
25	11	11
26	13[illegible]	[illegible]
27	143	[illegible]
28	11[illegible]	[illegible]
29	16	7
30	92	90
31	7[illegible]	[illegible]
32	[illegible]	[illegible]
33	[illegible]	[illegible]
34	31	[illegible]
35	34	[illegible]
H,4,1		
0	213	[illegible]
1	21[illegible]	[illegible]
2	[illegible]	[illegible]
3	347	[illegible]
4	445	425
5	116	[illegible]
6	136	133
7	82	[illegible]
8	41[illegible]	[illegible]
9	91	87
10	321	312
11	91	84
12	21	26
13	125	125
14	227	222
15	132	129
16	66	61
17	91	88
18	30	31
19	12[illegible]	122
20	86	86
21	83	85
22	119	122
23	[illegible]	71
24	86	84
25	127	126
26	71	70
27	73	70
28	39	38
29	77	75
30	46	45
31	13[illegible]	[illegible]
32	9[illegible]	88
33	[illegible]	28
		11

[illegible]	1[illegible]1	131
3	[illegible]	[illegible]
4	21[illegible]	20[illegible]
5	[illegible]	[illegible]
6	94	94
7	78	72
8	41	46
9	[illegible]	156
10	17	15
11	[illegible]	146
12	[illegible]	141
13	127	121
14	32	30
15	[illegible]	85
16	55	54
17	111	112
18	214	203
19	[illegible]	[illegible]
20	[illegible]	[illegible]
21	57	62
22	64	59
23	48	50
24	114	113
25	[illegible]	77
26	76	72
27	104	104
28	14	14
29	71	69
30	76	74
31	27	18
H,6,1		
0	44	41
1	54	55
2	43	40
3	197	188
4	85	75
5	82	81
6	104	100
7	45	51
8	92	[illegible]
9	129	122
10	57	56
11	113	111
12	62	62
13	128	127
14	34	31
15	66	87
16	30	32
17	63	63
18	60	56
19	131	124
20	26	21
21	90	93
22	54	53
23	20	24
24	68	68
25	47	51
[illegible]	[illegible]	39
[illegible]	[illegible]	93

H,7,1		
[illegible]	[illegible]	[illegible]
1	53	56
2	4[illegible]	42
3	11*	17
4	10[illegible]	10[illegible]
5	71	[illegible]
6	11[illegible]	[illegible]
7	38	37
8	36	35
9	56	54
10	44	44
11	65	64
12	71	71
13	63	66
14	61	60
15	49	46
16	74	87
17	51	51
18	109	107
19	113	112
20	72	75
21	37	35
H,8,1		
0	10*	1
1	51	47
2	65	59
3	59	53
4	116	119
5	41	44
6	40	38
7	17	15
8	52	45
9	10*	8
10	60	58
11	27	30
12	20	21
13	49	43
H,0,2		
0	501	495
1	109	137
2	224	240
3	159	173
4	207	232
5	185	187
6	443	501
7	63	66
8	356	371
9	481	491
10	523	533
11	52	51
12	563	580
13	246	245
14	21[illegible]	21[illegible]
15	2[illegible]	[illegible]
16	224	2[illegible]

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5 - DISTYRYL - THIOPHENE

Tab. 18

H,0,2

17	58	63
18	295	281
19	10*	11
20	127	129
21	46	49
22	57	61
23	40	45
24	193	189
25	104	102
26	16	18
27	328	323
28	183	179
29	171	173
30	148	147
31	14*	6
32	56	50
33	10*	15
34	10*	15
35	45	48
36	119	116

H,1,2

0	55	57
1	307	293
2	251	254
3	78	69
4	115	131
5	312	298
6	162	150
7	136	141
8	150	149
9	233	234
10	350	355
11	136	138
12	88	81
13	55	48
14	103	101
15	168	179
16	176	180
17	83	79
18	140	132
19	65	68
20	179	181
21	196	188
22	156	148
23	93	88
24	130	130
25	112	113
26	105	108
27	81	74
28	64	67
29	24	20
30	69	71
31	52	45
32	134	131
33	66	66
34	65	58
35	31	28
36	12*	5

H,2,2

0	65	60
1	176	172
2	98	98
3	142	129
4	137	128
5	151	150
6	195	180
7	416	399
8	185	176
9	70	67
10	108	108
11	524	516
12	249	227
13	308	301
14	202	202
15	87	89
16	59	50
17	240	238
18	104	99
19	192	195
20	86	83
21	68	66
22	66	66
23	181	184
24	114	112
25	139	137
26	193	188
27	148	146
28	83	82
29	112	112
30	90	90
31	94	90
32	48	50
33	36	36
34	10*	14
35	97	94

H,3,2

0	371	355
1	463	431
2	149	159
3	213	206
4	301	287
5	391	365
6	347	322
7	82	79
8	284	274
9	211	208
10	153	150
11	152	151
12	116	117
13	53	53
14	139	136
15	161	165
16	171	173
17	51	47
18	41	36
19	69	59
20	203	195
21	235	237
22	209	200
23	75	75
24	25	21
25	54	58
26	78	74
27	91	86
28	70	69
29	132	127
30	11*	16
31	50	50
32	57	50
33	123	119
34	80	80

H,4,2

0	133	132
1	225	222
2	243	223
3	200	200
4	76	74
5	108	106
6	327	312
7	59	56
8	121	122
9	54	53
10	82	77
11	137	125
12	185	183
13	118	118
14	50	51
15	92	87
16	74	79
17	119	117
18	209	213
19	66	68
20	143	143
21	56	56
22	144	139
23	81	83
24	176	174
25	11*	14
26	31	27
27	20	15
28	71	73
29	45	48
30	77	78
31	10*	17
32	58	57

H,5,2

0	112	107
1	141	133
2	100	99
3	306	294
4	243	235
5	81	81
6	148	148
7	75	71
8	65	69
9	149	147
10	77	76
11	123	125
12	21	14
13	69	70
14	96	98
15	51	51
16	57	59
17	147	141
18	77	74
19	137	139
20	83	84
21	91	88
22	57	60
23	67	66
24	58	56
25	35	34
26	55	59
27	99	100
28	52	54
29	28	25

H,6,2

0	91	88
1	201	194
2	14*	18
3	117	109
4	219	218
5	235	231
6	42	34
7	149	147
8	103	96
9	57	51
10	40	38
11	97	99
12	11*	3
13	24	25
14	92	97
15	41	46
16	67	75
17	114	118
18	32	31
19	78	82
20	31	33
21	36	36
22	116	127
23	85	86
24	56	62
25	80	86

H,7,2

0	67	63
1	40	39
2	87	84
3	95	95
4	131	136
5	10*	11
6	23	20
7	30	31
8	71	67
9	37	38
10	41	45
11	47	45
12	57	61
13	76	80
14	51	49
15	46	47
16	53	55
17	71	76
18	35	37
19	22	18

H,8,2

0	106	104
1	41	35
2	50	47
3	38	36
4	72	74
5	52	57
6	141	145
7	57	58
8	26	24

H,0,3

1	106	114
2	92	107
3	81	86
4	78	89
5	125	122
6	147	154
7	30	30
8	296	314
9	68	80
10	312	310
11	82	91
12	168	162
13	146	148
14	115	124
15	21	23
16	165	172
17	50	49
18	102	100
19	149	153
20	179	182
21	101	106
22	156	160
23	71	76
24	94	92
25	27	29
26	29	29
27	55	54
28	36	40
29	42	38
30	44	39
31	60	57
32	108	109
33	28	23
34	120	110

LIST /FO/ /FC/ OF 2.5 - DISTYRYL - THIOPHENE

Tab. 18

H.1.3

0	245	243
1	145	143
2	210	198
3	97	89
4	327	313
5	405	414
6	263	271
7	314	309
8	164	161
9	32	34
10	126	113
11	267	263
12	217	224
13	270	275
14	182	183
15	109	114
16	65	69
17	99	105
18	62	68
19	286	295
20	198	199
21	74	75
22	203	207
23	80	81
24	38	35
25	20	24
26	17	17
27	36	42
28	10*	12
29	10*	11
30	97	99
31	33	27
32	40	41
33	26	29

H.2.3

0	141	137
1	56	60
2	168	161
3	209	208
4	75	70
5	130	137
6	56	56
7	88	86
8	27	24
9	380	387
10	28	23
11	43	41
12	86	85
13	128	126
14	23	16
15	217	236
16	64	66
17	91	96
18	174	189
19	151	159
20	13*	21
21	229	231
23	65	70
24	103	106
25	172	176
26	46	46
27	34	42
28	39	38
29	142	145
30	70	74
31	60	63
32	19	16
33	116	117

H.3.3

0	17	14
1	190	194
2	95	90
3	98	95
4	134	134
5	71	82
6	170	165
7	119	120
8	79	75
9	116	108
10	175	166
11	60	65
12	140	142
13	112	113
14	79	82
15	131	129
17	61	57
18	193	207
19	114	113
20	173	176
21	88	91
22	17	18
23	119	114
24	75	81
25	85	86
26	82	87
27	11*	13
28	36	43
29	68	65
30	30	33
31	86	86

H.4.3

0	27	27
1	107	106
2	152	156
3	26	23
4	215	214
5	139	138
6	10*	6
7	74	67
8	161	162
9	32	28
10	175	165
11	122	117
12	74	77
14	140	142
15	11*	12
16	191	191
17	76	85
18	25	27
19	92	98
20	163	166
21	52	57
22	151	153
23	84	96
24	56	54
25	85	86
26	71	74
27	38	44
28	116	123
29	57	63

H.5.3

0	246	253
1	155	161
2	131	134
3	132	135
4	70	83
5	82	90
6	193	197
7	170	177
8	156	157
9	59	70
10	39	45
11	54	62
12	86	85
13	56	57
14	68	71
15	74	77
16	45	45
17	93	95
18	51	58
19	40	40
20	23	22
21	23	24
22	71	73
23	82	87
24	89	96
25	40	42

H.6.3

0	45	42
1	53	55
2	19	23
3	139	148
4	100	107
5	47	42
6	84	83
7	102	103
8	54	57
9	73	76
10	11*	23
11	27	25
12	[illegible]	[illegible]
14	36	42
15	53	56
16	28	34
17	70	75
18	10*	5
19	44	47
20	41	43
21	65	61

H.7.3

0	78	81
1	84	87
2	162	170
3	99	100
4	20	16
5	43	47
6	105	115
7	99	107
8	130	143
9	53	58
10	49	50
11	13*	7
12	31	32
13	28	34

H.0.4

0	46	42
1	68	68
2	76	81
3	10*	8
4	175	185
5	15	12
6	173	190
7	84	89
8	86	89
9	72	61
10	97	102
11	15	12
12	152	164
13	23	19
20	289	303
21	30	34
22	145	146
23	[illegible]	[illegible]
24	132	[illegible]
25	55	60
26	107	109
27	19	24
28	48	46
29	56	63
30	102	105

H.1.4

0	173	178
1	55	56
2	238	247
3	196	199
4	[illegible]	[illegible]
6	131	139
7	20	19
8	144	151
9	113	131
10	125	131
11	102	106
12	101	101
13	30	33
14	68	74
15	50	55
16	100	103
17	11*	17
18	132	132
19	126	141
20	57	60
21	158	165
22	103	113
23	80	86
24	30	33
25	31	38
26	55	53
27	95	90
28	49	52
29	50	50
30	10*	7

H.2.4

0	102	112
1	96	99
2	83	88
3	107	101
4	108	111
5	220	229
6	48	51
7	118	118
8	48	46
9	13*	9
10	73	74
11	187	192
12	18	18
13	80	83
14	24	20
15	70	71
16	148	159
17	118	117
18	153	165
19	173	182
20	56	62
21	87	91
22	61	66
23	116	114
24	64	66
25	76	79
26	30	35
27	28	33
28	13*	14
29	63	65

LIST /FO/ /FC/ OF 2,5 - DISTYRYL - THIOPHENE

Tab. 18

1	89	99
2	159	168
3	234	244
4	220	235
5	69	68
6	227	233
7	210	216
8	114	117
9	225	226
0	125	131
1	68	61
2	65	62
3	56	61
4	54	55
5	119	122
6	74	78
7	120	124
8	39	40
9	17	19
0	40	41
1	35	33
2	54	50
3	37	44
4	13*	12
5	67	76
6	65	73
7	21	16

H,4,4

0	147	152
1	20	10
2	93	101
3	81	87
4	117	121
5	135	137
6	84	84
7	68	79
8	57	60
9	87	94
0	128	135
1	69	75
2	97	99
3	24	25
4	77	80
5	23	24
6	51	54
7	30	29
8	68	76
9	35	37
0	28	33
1	39	44
2	22	46
3	23	47
4	24	93

H,5,4

0	47	53
1	87	92
2	64	66
3	132	143
4	59	56
5	126	136
6	80	89
7	80	85
8	90	92
9	106	121
10	84	90
11	56	58
12	30	37
13	47	52
14	52	57
15	75	81
16	49	58
17	52	61
18	23	22
19	31	35
20	30	33

H,6,4

0	37	46
1	64	66
1	64	66
2	44	41
3	22	25
4	56	62
5	10*	5
6	72	82
7	77	88
8	63	71
9	40	43
10	13*	15
11	63	67
12	21	29
13	90	103
14	13*	23

H,0,5

1	17*	6
2	326	269
3	120	108
4	172	146
5	243	214
6	79	67
7	17*	10
8	66	55
9	148	143
10	93	82
11	47	40
12	41	34
13	66	55
14	51	40
15	38	31
16	13*	9
17	17*	18
18	54	53
19	87	75
20	47	39
21	55	56
22	93	77
23	17*	24
24	25	23

H,1,5

0	81	77
1	216	188
2	143	115
3	77	61
4	224	171
5	246	202
6	141	122
7	278	224
8	244	199
9	175	144
10	83	66
11	89	71
12	109	100
13	82	64
14	90	76
15	75	59
16	101	82
17	116	99
18	57	51
19	96	77
20	91	75
21	43	29
22	52	46
23	66	54
24	93	73

H,2,5

0	70	64
1	123	102
2	161	140
3	203	166
4	87	68
5	79	72
6	143	155
7	117	101
8	82	79
9	122	109
10	100	87
11	110	94
13	79	61
14	67	69
15	150	129
16	78	59
17	61	53
18	47	42
19	44	46
20	77	63
21	163	137
22	37	29

H,3,5

0	124	109
1	60	65
2	18*	9
3	43	28
4	122	104
5	19*	21
6	144	122
7	131	114
8	76	72
9	52	44
10	14*	11
11	143	125
12	36	26
13	84	70
14	53	44
15	60	48
16	88	77
17	65	47
18	42	37
19	48	34
20	92	82

H,4,5

0	41	34
1	50	82
2	60	51
3	54	41
4	42	40
5	18*	20
9	51	45
8	85	72
7	119	116
6	18*	29
10	89	80
11	27	27
12	56	55
13	54	49
14	156	137
15	60	54

H,5,5

0	84	87
1	41	42
2	68	68
3	53	43
4	44	46
5	82	79
6	14*	6
7	32	34
8	73	64
9	32	35

H,0,6

0	26	40
1	62	66
2	55	65
3	97	107
5	77	90
8	157	188

H,1,6

0	50	67
4	104	115
10	103	115

H,2,6

0	11*	3
1	69	97
2	35	49
3	43	54
4	70	91
7	83	103

H,3,6

0	15*	28
1	36	58
2	58	89
3	90	125
4	32	32

LITERATURVERZEICHNIS

1) MEIER, H. (1974) Organic Semiconductors, Verlag Chemie, Weinh.

2) KOSSMEHL, G., HÄRTEL, M. & MANECKE, G. (1970) Makromol. Chemie 131, 15-36, 37-54.

3) HÄRTEL, M., KOSSMEHL, G., MANECKE, G., WILLE, W., WÖHRLE, D. & ZERPNER, D. (1973) Die Angewandte Makromolekulare Chemie 29/30, 307-347.

4) KUHN, H. (1953) Experientia IX, 41.

5) KRONIG, R. & PENNEY, W. (1931) Proc. Roy. Soc., Lond. 130, 499.

6) FLÜGGE, S. (1965) Rechenmethoden der Quantenmechanik, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York.

7) HAUPTMANN, H. & KARLE, J. (1956) Acta Cryst. 9, 635.

8) COCHRAN, W. & WOOLFSON, M. (1955) Acta Cryst. 8, 1-12.

9) HECHT, J. (1976) Dissertation, FU Berlin.

10) HAUPTMANN, H. & KARLE, J. (1959) Acta Cryst. 12, 93.

11) MAIN, P., WOOLFSON, M. & GERMAIN, G. (1971) MULTAN, A Computer Program for the Automatic Solution of Crystal Structures, Univ. of York Printing Unit, York, Version 1975

12) ZABEL, V. (1976) Dissertation, FU Berlin.

13) HAMILTON, W.C. (1965) Acta Cryst. 18, 501-510.

14) STOUT, G.H. & JENSEN, L.H. (1969) X-RAY Structure Determination, The Macmillan Company, Collier-Macmillan Limited, Lond.

15) WOOLFSON, M. (1970) X-RAY Crystallography, Cambridge, University Press.

16) DREISSIG, W. (1969) Dissertation, FU Berlin.

17) LUGER, P. (1970) Dissertation, FU Berlin.

18) HALL, S.L. (1972) X-RAY system of crystallographic computer programs, TR-192, Computer Science Center, Univ. of Maryland.

18a) KRAMERS, H. (1935) Physica, 2, 432.

19) CROMER, D.T. & MANN, J.B. (1965) Acta Cryst. A 24, 321-324.

20) STEWART, R.F., DAVIDSON, E. & SIMPSON, W.T. (1968) J. Chem. Phys. Vol. 42, 3175.

21) HUTTNER, G. & SCHELLE, S. (1971) MOLPLOT-Programm. Technische Universität München.

22) LUGER, P. & DREISSIG, W. (1969) Programm zur Auswertung von Intensitätsmessungen nach der Fünfwertmethode (unveröffentl.)

23) LARSON, A.C. (1967) Acta Cryst. 23, 664-665.

24) International Tables for X-Ray Crystallography (1968). Bd. III, 2. Aufl., S. 213, Birmingham: Kynoch Press.

25) VISSER, G.J., HEERES, G.J., WOLTERS, J.& VOS, A. (1968) Acta Cryst. B 24, 467-473.

26) FINDER, C.J., NEWTON, M.G. & ALLINGER, N.L. (1974) Acta Cryst. B 30, 411.

27) BROWN, C.J. (1966). Acta Cryst. 21, 146-152.

28) IBERS, J. & HAMILTON, W.C. (1964). Acta Cryst. 17, 781.

29) BROWN, C.J. (1966). Acta Cryst. 21, 153-158.

30) PAULING, L. (1969). Grundlagen der Chemie, Verlag Chemie, Weinheim.

31) SASADA, Y., SHIMANOUCHI, H., NAKANISHI, H. & HASEGAWA, M. (1971). Bull. of the Chemical Soc. of Japan, 44, 1262-1270.

32) DOMENICO, A., VACIAGO, A. & COULSON, C.A. (1975). Acta Cryst. B 31, 221-234.

33) ACHESON, (1964). An Introduction to the Chemistry of Heterocyclic Compounds. Interscience Publ. N.Y.

34) BUSCHMANN, J. & RUBAN, G. (1976) (Veröffentlichung in Vorb.)

35) HOLZAPFEL, G. & NINK, R. (1973). PTB-Mitteilungen, 4, 207-215.

36) BOHN, B. (1976) Dissertation, FU Berlin.

37) KOSSMEHL, G., BOHN, B. & BROSER, W. (1976). Makromolekulare Chemie 177, 2369-2395.

38) RUBAN, G. & ZOBEL, D. (1975). Acta Cryst. B 31, 2632.

Diese Arbeit wurde im Institut für Kristallographie der Freien Universität Berlin unter der Betreuung von Herrn Prof. Dr. G. Ruban durchgeführt. Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. G. Ruban für seine stete Diskussionsbereitschaft über diese Arbeit.

Herrn Prof. Dr. G. Koßmehl bin ich zu Dank verpflichtet für die Überlassung der Substanzen sowie für sein Interesse an dieser Arbeit und manch anregendes Gespräch.

Dankbar bin ich den Herren Prof. Dr. D. Hahn, Dr. R. Nink und H. Hieke für die Unterstützung bei der Messung der Photoleitfähigkeit und der Photoemission.

Allen wissenschaftlichen und technischen Mitarbeitern des Institutes für Kristallographie möchte ich herzlichen Dank sagen für die hilfsbereite Zusammenarbeit bei der Lösung der verschiedensten Probleme bei der Ausführung dieser Arbeit.

Weiterhin danke ich ganz besonders Frl. E. Müller für die druckreife Aufbereitung der Bilder und des Textmaterials.

LEBENSLAUF

Am 29. Mai 1941 wurde ich, Dieter Zobel, als Sohn des Malermeisters Erwin Zobel und seiner Ehefrau Erna, geb. Gruhn, in Berlin geboren.

Von 1947 bis 1954 besuchte ich die Grundschule mit einem Jahr Unterbrechung aus Krankheitsgründen. Von 1954 bis 1961 besuchte ich nacheinander die Oberschulen des Praktischen, des Technischen und des Wissenschaftlichen Zweiges, wo ich 1961 die Reifeprüfung ablegte.

Nach einem viermonatigen Aufenthalt in den USA begann ich im WS 1961/62 das Studium der Physik an der FU Berlin. Nach dem Bestehen der Diplom-Vorprüfung 1966 begann ich 1967 als Praktikant an der Physikalisch-Technischen-Bundesanstalt, Institut Berlin mit der Anfertigung der Diplomarbeit. Die Diplomprüfung legte ich dann 1969 an der FU Berlin ab.

Von 1969 bis 1972 arbeitete ich als Entwicklungsingenieur am damaligen Institut für Automation der AEG Berlin auf dem Gebiet der Laseranwendung und der Industrie-Elektronik.

Von 1972 bis 1976 war ich als Wiss. Assistent am Institut für Kristallographie der FU Berlin beschäftigt. In dieser Zeit entstand die vorliegende Dissertation.

Seit 1970 bin ich verheiratet und habe zwei Kinder.

F. Höpfner Dissertationsdruck · Pestalozzistr. 106
1000 Berlin 12 · Tel. 030 / 3 12 88 85 + 3 13 81 98